

UNICAMP

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE
CAMPINAS

Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica

BRUNA DE OLIVEIRA GONÇALVES

Modelo de crescimento com interação cooperativa

Campinas

2019

Bruna de Oliveira Gonçalves

Modelo de crescimento com interação cooperativa

Tese apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutora em Estatística.

Orientadora: Marina Vachkovskaia

Este exemplar corresponde à versão final da Tese defendida pela aluna Bruna de Oliveira Gonçalves e orientada pela Profa. Dra. Marina Vachkovskaia.

Campinas

2019

Agência(s) de fomento e nº(s) de processo(s): CAPES

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica
Ana Regina Machado - CRB 8/5467

G586m Gonçalves, Bruna de Oliveira, 1991-
Modelo de crescimento com interação cooperativa / Bruna de Oliveira
Gonçalves. – Campinas, SP : [s.n.], 2019.

Orientador: Marina Vachkovskaia.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de
Matemática, Estatística e Computação Científica.

1. Markov, Cadeias de. 2. Simulação de processos. 3. Comportamento
assintótico de soluções. 4. Probabilidades. I. Vachkovskaia, Marina, 1975-. II.
Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e
Computação Científica. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Growth model with interaction cooperative

Palavras-chave em inglês:

Markov chains

Process simulation

Asymptotic behavior of solutions

Probabilities

Área de concentração: Estatística

Titulação: Doutora em Estatística

Banca examinadora:

Marina Vachkovskaia [Orientador]

Christophe Frédéric Gallesco

Elcio Lebensztayn

Fábio Prates Machado

Anatoli Iambartsev

Data de defesa: 26-02-2019

Programa de Pós-Graduação: Estatística

**Tese de Doutorado defendida em 26 de fevereiro de 2019 e aprovada
pela banca examinadora composta pelos Profs. Drs.**

Prof(a). Dr(a). MARINA VACHKOVSKAIA

Prof(a). Dr(a). CHRISTOPHE FRÉDÉRIC GALLESKO

Prof(a). Dr(a). ELCIO LEBENSZTAYN

Prof(a). Dr(a). FÁBIO PRATES MACHADO

Prof(a). Dr(a). ANATOLI IAMBARTSEV

A Ata da Defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós-Graduação do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.

*Dedico este trabalho primeiramente a Deus,
ao meu pai Sebastião e a minha mãe Maria.*

Agradecimentos

Agradeço a Deus e a Nossa Senhora, por estarem sempre comigo, me iluminando e guiando meus passos.

Agradeço aos meus pais, minha irmã Daiane, meu noivo Flávio e aos meus avós que, com muito carinho e apoio, não mediram esforços para que eu chegasse até esta etapa da minha vida. Agradeço meu avô Oliveiros, que agora está com Deus, por todo o amor, confiança e ensinamentos. Que falta o senhor me faz vovô!

Agradeço à minha querida orientadora, Marina Vachkovskaia, por toda a sua dedicação, apoio, confiança e ensinamentos. Gostaria de expressar toda a minha gratidão e admiração por sua serenidade e competência.

Agradeço à Universidade Estadual de Campinas e aos Professores e funcionários do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica pelos ensinamentos e contribuição para a minha formação.

Agradeço aos meus colegas de turma Marcos, Nathalia, Ana Roberta, Jaime, Mario, Renata e Omar pela amizade e companheirismo.

Agradeço as minhas amigas e companheiras de casa Livia e Rejiane por suas amizades sinceras e pelo apoio de sempre, independente da distância entre nós. Ao meu amigo Fabricio pelos inúmeros conselhos. Agradeço ainda ao meu amigo Felipe pelas suas reflexões.

Agradeço aos membros das bancas do exame de qualificação e de defesa pela participação na banca, pelas sugestões e contribuições para o desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço a todos que, de alguma forma, contribuíram para a realização desse trabalho.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil(CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

No processo de acumulação de moléculas em uma superfície, as partículas são alojadas em sítios, processo chamado de adsorção. Tal fenômeno possui grande importância tecnológica em diversas áreas como, na purificação e separação de misturas em indústrias petrolíferas, em tratamentos de efluentes e na fabricação de biomateriais como próteses e implantes. Portanto, estudos envolvendo o desenvolvimento e aprimoramento de materiais adsorventes e a compreensão do processo de adsorção são de grande importância à pesquisa de materiais que possam, além de ser usados como adsorventes, ser economicamente viáveis. Assim, propôs-se neste trabalho o estudo do comportamento assintótico da configuração das partículas formadas pelo processo de adsorção por meio de um modelo probabilístico. O modelo considerado para a análise do comportamento do processo de crescimento permite a adsorção em multicamadas sem restrição ao número de partículas a serem adsorvidas e considera o método de adsorção no qual o destino da partícula a ser adsorvida é afetado pela vizinhança de cada sítio. O principal resultado obtido foi a ocorrência de explosão quando a probabilidade de adsorção em um sítio k é proporcional à $e^{\lambda_k U_k}$.

Palavras-chave: adsorção; modelo probabilístico; estrutura assintótica; processo de crescimento.

Abstract

In the process of accumulation of molecules on a surface, called process of adsorption, the particles are allocated in vertices of a graph. Such phenomenon has great technological importance in the purification and separation of mixtures in petroleum industries, in effluent treatment, and in the manufacture of biomaterials such as prostheses and implants. Thus, this paper refers to the study of the asymptotic behavior of a growth process, which is the process of adsorption of particles in an infinite number of sites, using a probabilistic model. The model considered here allows the adsorption in multilayer without restriction to the number of particles adsorbed and considers the cooperative sequential adsorption model. The main result obtained was the occurrence of an explosion when the probability of adsorption at a site k is proportional to the $e^{\lambda_k U_k}$.

Keywords: adsorption; probabilistic model; asymptotic structure; growth process.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Esquema representado com superfícies livres e ocupadas em uma superfície com 10 sítios na formação de monocamada.	25
Figura 2 – Esquema representado com superfícies livres e ocupadas em uma superfície com 10 sítios na formação de multicamadas.	26
Figura 3 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	53
Figura 4 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	54
Figura 5 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 8 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	55
Figura 6 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	56
Figura 7 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=1000$ e (d) $n=10000$	57
Figura 8 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/\log(i + 1)$, configuração inicial $(1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	58
Figura 9 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/\log(i + 1)$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	59
Figura 10 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/e^i$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	60
Figura 11 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/e^i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	61
Figura 12 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/e^i$, configuração inicial com partículas nos sítios de 10 à 30 e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=1000$ e (d) $n=10000$	62

Figura 13 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	63
Figura 14 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	64
Figura 15 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial com partículas nos 8 primeiros sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	65
Figura 16 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	66
Figura 17 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	67
Figura 18 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	68
Figura 19 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (6, 7, 9, 4, 6, 24, 22, 13, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	69
Figura 20 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (34, 51, 41, 64, 50, 16, 21, 6, 29, 9, 37, 67, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	70
Figura 21 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	71
Figura 22 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	72
Figura 23 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (20, 9, 37, 44, 44, 9, 40, 50, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	73
Figura 24 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (68, 71, 69, 9, 83, 76, 53, 43, 82, 61, 22, 5, 0, 0, \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	74
Figura 25 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \text{sen}(i) $, configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	75

Figura 26 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \text{sen}(n) $, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0 \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	76
Figura 27 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \text{sen}(n) $, configuração inicial $x = (2, 19, 21, 17, 29, 14, 25, 10, 0 \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	77
Figura 28 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \text{sen}(n) $, configuração inicial $x = (2, 3, 5, 3, 3, 4, 2, 1, 4, 3, 2, 4, 0 \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$	78
Figura 29 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ (d) $n=1000$	79
Figura 30 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=100$ (b) $n=1000$	80
Figura 31 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (1, 4, 3, 1, 2, 3, 4, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=100$ (b) $n=1000$	81
Figura 32 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (28, 4, 22, 25, 11, 21, 13, 23, 30, 3, 14, 21, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=100$ (b) $n=1000$	82

Lista de abreviaturas e siglas

ASA	Adsorção sequencial aleatória
ASC	Adsorção sequencial cooperativa

Lista de símbolos

\mathbb{R}_+^n	Conjunto dos vetores y pertencentes a \mathbb{R}^n que satisfazem $y \geq 0$
\mathbb{Z}_+^n	Conjunto dos vetores y pertencentes a \mathbb{Z}^n que satisfazem $y > 0$
$\xi_i(x)$	quantidade de partículas adsorvidas no sítio i para a configuração x
$U_i(x)$	quantidade de partículas na vizinhança do sítio i para a configuração x
e_i	$e_i = (\xi_1, \xi_2, \dots)$, onde $\xi_i = 1$ e $\xi_j = 0 \ \forall j \neq i$
$X(t)$	configuração no tempo t
ω_1	$\omega_1 = \inf\{t, X(t) \neq X(0)\}$
ω_i	$\omega_i = \inf\{t > \omega_{i-1}, X(t) \neq X(\omega_{i-1})\}$
A_n^i	evento em que tempo n uma partícula é adsorvida pelo sítio i
$A_{[n_j, n_{j+1})}^i$	evento em que entre os tempo n_j e n_{j+1} todas as partículas são adsorvidas no sítio i

Sumário

	Introdução	16
1	PRELIMINARES	18
1.1	Cadeia de Markov em tempo discreto	18
1.1.1	Recorrência e transiência	19
1.2	Cadeia de Markov em tempo contínuo	20
1.2.1	Explosão	22
1.3	Adsorção	24
2	MODELOS E RESULTADOS	29
2.1	Descrição do modelo	29
2.2	Taxas exponenciais	30
2.2.1	Explosão	31
2.2.2	Taxas decrescentes	31
2.2.3	Taxas crescentes	31
2.2.4	Caso geral	32
2.3	Taxas polinomiais	32
2.3.1	Explosão	32
2.4	Taxas logarítmicas	33
2.4.1	Explosão	33
3	LEMAS	34
4	DEMONSTRAÇÕES DOS RESULTADOS	36
4.1	Demonstração do Teorema 2.2.1	36
4.2	Demonstração do Teorema 2.2.2	37
4.3	Demonstração do Teorema 2.2.3	38
4.4	Demonstração do Teorema 2.2.4	39
4.5	Demonstração do Teorema 2.3.1	40
4.6	Demonstração do Teorema 2.4.1	42
5	DEMONSTRAÇÃO DOS LEMAS	44
5.1	Demonstrações dos Lemas 3.0.1 e 3.0.2	44
5.2	Demonstrações dos Lemas 3.0.3, 3.0.4 e 3.0.5	48
6	SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE CRESCIMENTO	51
6.1	Simulação	51

6.1.1	Método da transformada inversa	51
6.2	Resultados das simulações	52
6.2.1	Lambdas decrescentes	53
6.2.2	Lambdas crescentes	63
6.2.3	Caso geral	74
6.2.4	Lambdas constantes	78
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	83
	REFERÊNCIAS	84
	ANEXOS	86
	ANEXO A – IDEIA DA DEMONSTRAÇÃO DAS HIPÓTESES 1	
	E 2	87
	ANEXO B – IDEIA DA DEMONSTRAÇÃO DA HIPÓTESE 3 . . .	90

Introdução

O processo de crescimento de partículas em uma superfície sólida, ocorrido pelo acúmulo químico ou físico dessas por mecanismos químicos, na interface entre a superfície sólida e a solução é chamado de processo de adsorção.

O processo de adsorção pode ocorrer por duas formas distintas, adsorção física e adsorção química. Na adsorção física, as moléculas ou átomos se aderem à superfície do adsorvente, em geral, por ligações intermoleculares. A adsorção química ocorre por ligações químicas, assim existe uma forte ligação da molécula adsorvida à superfície do adsorvente, sendo o processo irreversível desde que não haja uma quantidade relativamente grande de energia.

O modelo básico utilizado para a adsorção é o modelo da adsorção sequencial aleatória (ASA). Nesse modelo, a probabilidade de adsorção é a mesma, ou seja, as partículas são adsorvidas de maneira aleatória e independente dos estados vizinhos e excluindo-se sobreposições. A ASA não é apropriada para muitos processos físicos, químicos e biológicos, nesses casos, é mais apropriado o modelo da adsorção sequencial cooperativa (ASC). No modelo ASC, o destino da partícula a ser adsorvida é afetado pela vizinhança de cada sítio, o que pode contribuir para a adsorção da próxima partícula ou vice-versa.

A adsorção é importante em inúmeras situações no dia a dia, como por exemplo, a utilização de carvão ativado em geladeiras para reter o odor originado dos alimentos ou nos purificadores de água de uso doméstico que utilizam carvão aditivado para remover, por meio de adsorção, impurezas contidas na água. A adsorção também ocorre nos catalisadores dos automóveis que adsorvem óxido de carbono (CO) e molécula de oxigênio (O_2) sobre a superfície do catalisador.

Existem vários estudos envolvendo o desenvolvimento e aprimoramento de materiais adsorventes, como biomateriais aplicados em processos de purificação e materiais que podem ser utilizados para substituir ou reparar tecidos em falta e colaborar com a interação com o corpo humano. [Aguiar, Novaes e Guarino \(2002\)](#), estudaram tipos de adsorventes para serem usados na purificação da água e [Rezende et al. \(2015\)](#), estudaram a influência da adsorção de proteínas na osseointegração em implantes dentários. Segundo os autores, a adsorção apresenta influência decisiva nas interações subsequentes entre as células e o implante, já que células só irão aderir e se proliferar sobre uma superfície recoberta por proteínas adsorvidas.

A compreensão dos fenômenos de adsorção é, portanto, de grande importância à pesquisa de materiais que possam, além de ser usados como adsorventes, ser economicamente viáveis. Assim, o objetivo desse trabalho é estudar o comportamento do processo

de adsorção por meio de um modelo probabilístico.

O modelo considerado para o estudo do comportamento do processo de crescimento permite a adsorção em multicamadas sem restrição ao número de partículas a serem adsorvidas e considera o modelo ASC. Como não há limitação quanto ao número de partículas adsorvidas em cada sítio, temos o interesse em estudar a estrutura assintótica da configuração formada pelas partículas. A probabilidade de adsorção no sítio k é proporcional à uma função $f(\lambda_k, U_k)$, em que $\lambda_k > 0$ e U_k é o total de partículas adsorvidas na vizinhança do sítio k , assim a quantidade de partículas na vizinhança de um sítio juntamente com o valor de λ_k , influencia a probabilidade de adsorção da próxima partícula.

Os principais resultados obtidos, quando a probabilidade de adsorção no sítio k é proporcional à $e^{\lambda_k U_k}$, foram que a partir de um certo tempo existe um sítio, com probabilidade positiva de adsorver uma partícula e com λ sendo máximo local, tal que as partículas são adsorvidas por esse sítio quase certamente. Quando os λ 's são decrescentes a partir de um certo tempo as partículas são adsorvidas no sítio 1 quase certamente. Já para λ 's crescentes as partículas são adsorvidas por sítios subsequentes. Além disso, foi obtido que para todos os λ 's analisados em um tempo finito infinitas partículas são adsorvidas.

Este trabalho encontra-se estruturado da seguinte forma: no capítulo 1 são apresentadas algumas definições e fundamentação teórica necessárias nos capítulos posteriores. No capítulo 2, está apresentado os modelos e os resultados obtidos. No capítulo 3 estão as demonstrações dos resultados. O capítulo 4 apresenta uma discussão sobre as simulações e os gráficos obtidos para verificar a estrutura do processo de adsorção.

1 Preliminares

Neste capítulo serão apresentados algumas definições e resultados necessários para os capítulos posteriores.

1.1 Cadeia de Markov em tempo discreto

Ao construir um processo estocástico $X_t : (\Omega, \mathcal{F}) \rightarrow (\mathbb{X}, \mathcal{F}')$, um dos desafios é modelar a dependência e apresentar uma melhor representação da realidade. De acordo com [Resnick \(2013\)](#), um processo de Markov é um caso particular de processo estocástico que equilibra bem essas duas exigências, já que tem a propriedade de que, condicionada a estados passados até o presente, a estrutura probabilística do futuro depende apenas do estado presente.

Um processo de Markov é denominado cadeia de Markov quando X_t está definido em um espaço de estados discreto. [Menshikov, Popov e Wade \(2016\)](#), definem cadeia de Markov da seguinte forma

Definição 1. *Um processo X_t , adaptado à \mathcal{F}_t com valores no espaço de estados $(\mathbb{X}, \mathcal{F}')$, é uma cadeia de Markov se para qualquer $B \in \mathcal{F}'$, $t \geq 0$ e $m \geq 1$,*

$$P[X_{t+m} \in B \mid \mathcal{F}_t] = P[X_{t+m} \in B \mid X_t], \text{ q.c.} \quad (1.1)$$

Essa igualdade é chamada propriedade de Markov e uma matriz $P = \{p_{i,j}\}_{i,j \in \mathbb{X}}$, em que $p_{i,j} = P(X_{t+1} = j \mid X_t = i)$, é chamada de matriz de transição da cadeia de Markov. O valor $p_{i,j}$ representa a probabilidade de transição do estado i para o estado j . Como são probabilidades e sabendo que o processo deve fazer uma transição para algum estado, então

$$p_{i,j} \geq 0, \quad (1.2)$$

para todo i, j e

$$\sum_{k \in \mathbb{X}} p_{i,k} = 1. \quad (1.3)$$

De acordo com [Bremaud \(2013\)](#), a matriz P indexada por \mathbb{X} e satisfazendo as propriedades acima também pode ser chamada de matriz estocástica.

1.1.1 Recorrência e transiência

Considere um processo X_t adaptado à filtração \mathcal{F}_n com valores no espaço de estados $(\mathbb{X}, \mathcal{F})$. Para $A \in \mathbb{X}$ pode-se definir τ_A da seguinte forma

$$\tau_A := \min\{t \geq 0 : X_t \in A\}, \quad (1.4)$$

e

$$\tau_A^+ := \min\{t \geq 1 : X_t \in A\}. \quad (1.5)$$

Definição 2. Para uma cadeia de Markov X_t , um estado $x \in \mathbb{X}$ é denominado *recorrente* se

$$P_x(\tau_x^+ < \infty) = 1. \quad (1.6)$$

Um estado recorrente pode ser classificado como *recorrente positivo* se

$$E_x \tau_x^+ < \infty, \quad (1.7)$$

e *recorrente nulo* se

$$E_x \tau_x^+ = \infty. \quad (1.8)$$

Definição 3. Para uma cadeia de Markov X_t , um estado $x \in \mathbb{X}$ é denominado *transiente* se

$$P_x(\tau_x^+ < \infty) < 1. \quad (1.9)$$

Portanto, um estado é dito ser transiente se, entrando nesse estado, o processo pode nunca retornar e recorrente se entrando nesse estado, o processo irá retornar para esse estado. Se o processo entrar em um estado e nunca deixar esse estado então o processo é dito absorvente, ou seja, $P_x[X_n = x] = 1$ para todo $n \in \mathbb{N}$. Uma cadeia de Markov é recorrente se todos os seus estados são recorrentes e transiente se todos os seus estados são transientes.

Outra propriedade de cadeia de Markov é a irredutibilidade, que pode ser definida como

Definição 4. Uma cadeia de Markov é dita *irredutível* se $\mathbb{P}_x[\tau_y < \infty] > 0$ para todo $x, y \in \mathbb{X}$.

Cadeias de Markov em tempo discreto também pode ser classificadas de acordo com o período, como a definição a seguir

Definição 5. *Para uma cadeia de Markov irredutível, o período desta é definido como o máximo divisor comum de $\{n \in \mathbb{N} : \mathbb{P}_x[X_n = x] > 0\}$. Se a cadeia tem período 1 é aperiódica.*

Para analisar o comportamento a longo prazo das probabilidades de transição, existem teoremas assintóticos que estabelecem sob certas restrições que cadeias de Markov convergem para uma distribuição chamada distribuição estacionária.

Definição 6. *Uma distribuição de probabilidade $\pi = \{\pi_j, j \in \mathbb{X}\}$ é uma distribuição estacionária para uma cadeia de Markov com matriz de transição P se*

$$\pi_j = \sum_{k \in \mathbb{X}} \pi_k p_{k,j}, \quad j \in \mathbb{X}.$$

Se há um número finitos estados então $\pi = (\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n)$ e pode-se, então encontrar a distribuição invariante resolvendo um sistema linear de equações

$$\pi = \pi P,$$

além disso a condição

$$\pi_1 + \pi_2 + \dots + \pi_n = 1,$$

deve ser satisfeita.

Sabe-se que um sistema de equações desse tipo pode ter única solução, múltiplas soluções, ou ainda pode não ter solução. O que garante a existência de uma única solução é a ergodicidade, que pode ser definida como

Definição 7. *Uma cadeia é dita Ergódica se for irredutível, recorrente positiva e aperiódica.*

Segundo [Durrett \(2016\)](#), a importância da cadeia de Markov vêm de dois fatos, a aplicação em área biológicas, físicas, econômicas e sociais e por apresentar uma teoria bem desenvolvida. Em uma cadeia de Markov, embora os estados sejam discretos, o parâmetro t pode assumir valores em conjuntos discretos ou contínuos, nesse caso tem-se uma cadeia de Markov em tempo contínuo.

1.2 Cadeia de Markov em tempo contínuo

Um processo estocástico $(X(t), t \in \mathbb{R}_+)$ é uma cadeia de Markov em tempo contínuo se vale a condição de Markov de que o estado futuro depende somente do estado atual e é independente dos estados passados. A diferença entre uma cadeia de Markov em

tempo discreto e em tempo contínuo é que em tempo contínuo as transições dos estados podem ocorrer a qualquer momento.

Para uma cadeia de Markov em tempo contínuo, considera-se uma matriz, onde cada elemento não diagonal da linha i e coluna j representa a taxa de transição do estado i para o estado j , denominada gerador infinitesimal.

Denota-se o gerador infinitesimal da cadeia de Markov por $\Gamma = (\Gamma_{xy}, x, y \in \mathbb{X})$, que é a matriz satisfazendo $\Gamma_{xy} \geq 0$ se $x \neq y$ e $\Gamma_{xx} = -\gamma_x$ em que $\gamma_x = \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy}$. Assim, a matriz estocástica P é dada, por

$$P_{xy} = \begin{cases} \frac{\Gamma_{xy}}{\gamma_x} & \text{se } \gamma_x \neq 0 \\ 0 & \text{se } \gamma_x = 0 \end{cases} \quad \text{para } x \neq y, \quad \text{e } P_{xx} = \begin{cases} 0 & \text{se } \gamma_x \neq 0 \\ 1 & \text{se } \gamma_x = 0 \end{cases} \quad (1.10)$$

Então P é uma matriz de transição de uma cadeia de Markov em tempo discreto, chamada de cadeia imersa, definida por $(\tilde{X}(t), t \in \mathbb{Z}_+)$.

Propriedades como recorrência, transiência e irredutibilidade são análogas às consideradas em uma cadeia de Markov em tempo discreto, já que uma cadeia de Markov em tempo contínuo possui tais propriedades se, e somente se, a cadeia imersa possui.

Supondo que a cadeia de Markov é irredutível e que $0 < \gamma_x < \infty$ para todo x no espaço de estados, define-se a sequência $\sigma = (\sigma_n)_{n \geq 1}$ de tempos de espera aleatórios, condicionados a \tilde{X} , distribuídos exponencialmente, ou seja,

$$P(\sigma_n \in ds \mid \tilde{X}) = \gamma_{\tilde{X}_{n-1}} e^{-s\gamma_{\tilde{X}_{n-1}}} \mathbb{I}_{\mathbb{R}_+}(s) ds, n \geq 1, \quad (1.11)$$

Assim,

$$E[\sigma_n \mid \tilde{X}] = \frac{1}{\gamma_{\tilde{X}_{n-1}}}. \quad (1.12)$$

Dessa forma, a sequência $\tau = (\tau_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de tempos de pulos aleatórios pode ser definida por $\tau_0 = 0$ e para $n \geq 1$ por $\tau_n = \sum_{k=1}^n \sigma_k$.

A distribuição estacionária, assim como as outras propriedades da Cadeia de Markov em tempo contínuo, é obtida pela matriz de transição da cadeia imersa P . Já para definir a ergodicidade de uma cadeia de Markov em tempo contínuo será necessário a próxima definição

Definição 8. Um processo é denominado regular se

$$P_i[\tau_\infty = \infty] = 1, \quad \forall i \in \mathbb{X}.$$

[Resnick \(2013\)](#), define ergodicidade de uma cadeia de Markov em tempo contínuo como

Definição 9. *Uma cadeia de Markov regular $\{X(t), t \geq 0\}$ é ergódica se $\tilde{X}(t)$ é recorrente, irreduzível e existe uma distribuição estacionária.*

1.2.1 Explosão

Em uma cadeia de Markov em tempo contínuo o tempo de permanência em um estado é distribuído exponencialmente, e assim no caso de taxas não homogêneas e não limitadas pode então ocorrer infinitas mudanças de estados em um tempo finito. Seja $\zeta = \lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n$, assim a cadeia de Markov explode se $\{\zeta < \infty\}$, ou seja, se em um tempo finito ocorre infinitas mudanças de estado. [Kersting e Klebaner \(1995\)](#), definem explosão da seguinte forma

Definição 10. *Seja $X(t)$ uma cadeia de Markov em tempo contínuo e considerando tempo de espera em cada estado com distribuição exponencial com parâmetros $\gamma_x \in \mathbb{R}$ então ocorre explosão se*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\gamma_{\tilde{X}_n}} < \infty, \quad (1.13)$$

em que $\tilde{X}(t)$ é o estado da cadeia imediatamente após a n -ésima passagem.

Já que $P_i[\tau_{\infty} = \infty] = 1$ se e somente se $P_i \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\gamma_{\tilde{X}_n}} = \infty \right] = 1$, então se não ocorre explosão a cadeia de Markov é regular.

Verificar a ocorrência ou não do fenômeno de explosão pode ser difícil, já que requer o conhecimento de toda a trajetória da cadeia de Markov imersa. Portanto, alguns teoremas, como os apresentados por [Menshikov e Petritis \(2014\)](#), são usados para verificar tal fenômeno. Para apresentar esses teoremas, são necessárias notações como de funções mensuráveis no espaço de estados $(\mathbb{X}, \mathcal{F})$, definido como

$$m\mathcal{F}' := \{f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ é } \mathcal{F}'\text{-mensurável}\} \quad (1.14)$$

e domínio da função geradora

$$\text{Dom}(\Gamma) := \{f \in m\mathcal{F}' : \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus x} \Gamma_{x,y} |f(y)| < +\infty, \forall x \in \mathbb{X}\} \quad (1.15)$$

e assim, $\text{Dom}_+(\Gamma)$ é o conjunto de funções não negativas no domínio e $\Gamma f(x)$ é definido como

$$\Gamma f(x) := \sum_{y \in \mathbb{X}} \Gamma_{xy} f(y). \quad (1.16)$$

Teorema 1.2.1. *São equivalentes:*

1. $\exists f \in \text{Dom}_+(\Gamma)$ estritamente positiva e $\varepsilon > 0$ tal que $\Gamma f(x) \leq -\varepsilon$, $\forall x$.
2. O tempo de explosão ζ satisfaz $E_x \zeta < +\infty$, $\forall x \in \mathbb{X}$.

Proposição 1. *Seja $f \in \text{Dom}_+ \Gamma$ uma função limitada e estritamente positiva em que $b = \sup_{x \in \mathbb{X}} f(x)$, assumindo que exista uma função crescente, não necessariamente estritamente crescente, $g : \mathbb{R}_+ \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}_+ \setminus \{0\}$ de tal modo que $\int_0^b \frac{1}{g(y)} dy < \infty$. Se $\Gamma f(x) \leq -g(f(x))$ para todo $x \in \mathbb{X}$, então $E_x \zeta < \infty$ para todo x .*

A última proposição é útil apenas quando $\inf_{x \in \mathbb{X}} g(f(x)) = 0$, já que essa condição é mais fraca do que a condição requerida no Teorema 1.2.1. O próximo teorema garante explosão considerando um subconjunto próprio de \mathbb{X} .

Teorema 1.2.2. *Seja A um subconjunto próprio, finito ou infinito, de \mathbb{X} e $f \in \text{Dom}_+(\Gamma)$ tal que*

1. *Existe $x_0 \notin A$ com $f(x_0) < \inf_{x \in A} f(x)$,*
2. *$\Gamma f(x) \leq -\varepsilon$ em A^c*

Então, $E_x[\zeta \mid \tau_A = \infty] < \infty$.

Já o próximo teorema garante a não ocorrência de explosão.

Teorema 1.2.3. *Seja $f \in \text{Dom}_+(\Gamma)$. Se*

- 1- *$f \rightarrow \infty$*
 - 2- *Existe uma função crescente, não necessariamente estritamente crescente, $g : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ tal que $G(z) := \int_0^z \frac{dy}{g(y)} < +\infty$, para todo $z \in \mathbb{R}_+$, mas $\lim_{z \rightarrow \infty} G(z) = \infty$.*
 - 3- *$\Gamma f(x) \leq g(f(x))$, para todo $x \in \mathbb{X}$,*
- Então $\mathbb{P}_x(\zeta = +\infty) = 1$, para todo $x \in \mathbb{X}$.*

As demonstrações dos últimos teoremas e da última proposição apresentada podem ser encontradas em [Menshikov e Petritis \(2014\)](#).

Como um exemplo de cadeia de Markov, pode-se considerar um jogo de tabuleiro cuja posição do jogador é definida pelo lançamento de um dado, pois nesse caso a próxima posição dependerá apenas da posição atual do jogador. Já em um jogo de baralho, o sorteio de uma carta depende das outras cartas que foram sorteadas e não apenas da última. Portanto não é uma cadeia de Markov.

Um outro exemplo clássico de aplicabilidade das Cadeias de Markov em teoria dos jogos talvez seja o problema da ruína do jogador. Podemos também citar a teoria de filas, processos migratórios, epidemiológicos, difusão de informação e muitos outros como, processo de acumulação de moléculas na superfície de um material.

No processo de acumulação de moléculas em uma superfície, as partículas são alojadas em sítios, processo chamado de adsorção, e a probabilidade de alojamento de uma nova partícula em um determinado sítio vai depender apenas da última configuração de partículas alojadas, caracterizando assim um processo de Markov. Além disso, o processo pode ser também caracterizado como um processo de crescimento.

1.3 Adsorção

De acordo com [Pozza et al. \(2009\)](#) “O fenômeno de adsorção pode ser entendido como o acúmulo químico ou físico de uma substância ou material por mecanismos químicos, principalmente na interface entre a superfície sólida (adsorvente) e a solução (adsorvato)”.

O fenômeno da adsorção ficou conhecido desde o século XVIII, quando C. W. Scheele observou que substâncias porosas possuíam a propriedade de adsorverem vapores, segundo [Weber \(1972\)](#). Porém vários fenômenos associados a adsorção já eram conhecidos e de acordo com [Rouquerol et al. \(2013\)](#), propriedades adsorventes de materiais como argila, areia e carvão eram utilizadas pelos antigos egípcios, gregos e romanos. A partir daí vários estudos foram realizados em sistemas constituídos de sólidos e gases.

Segundo [Rouquerol et al. \(2013\)](#), a adsorção possui grande importância tecnológica. Atualmente, o processo de adsorção é importante em inúmeras situações como, por exemplo, nos purificadores de água de uso doméstico que utilizam carvão aditivado para remover, por meio de adsorção, impurezas contidas na água. A adsorção também ocorre nos catalisadores dos automóveis que adsorvem óxido de carbono (CO) e molécula de oxigênio (O_2) sobre a superfície do catalisador. A adsorção de proteínas também é um processo de extrema importância na interação entre biomateriais e tecidos. A osseointegração, por exemplo, está relacionada com o filme de óxido formado sobre a superfície do titânio de um implante e as proteínas sobre ele adsorvidas.

O adsorvato concentra-se na superfície do adsorvente, assim segundo [Borba \(2006\)](#), quanto maior for esta superfície, maior será a eficiência da adsorção, ou seja,

depende da área da superfície. Segundo [Ansón et al. \(2004\)](#) a quantidade de moléculas absorvidas pela superfície depende de várias condições e características além da área da superfície, como temperatura, pressão, distribuição de energia superficial.

Na Figura 1, está apresentado um esquema simplificado do processo de adsorção, considerando um segmento $\{1, 2, \dots, 10\}$, em que apenas uma partícula pode ser adsorvida em cada sítio. Cada espaço vazio representa um sítio e de acordo com esse esquema apenas mais 3 partículas poderão ser adsorvidas pela superfície. Esse tipo de adsorção representa à formação de uma monocamada.

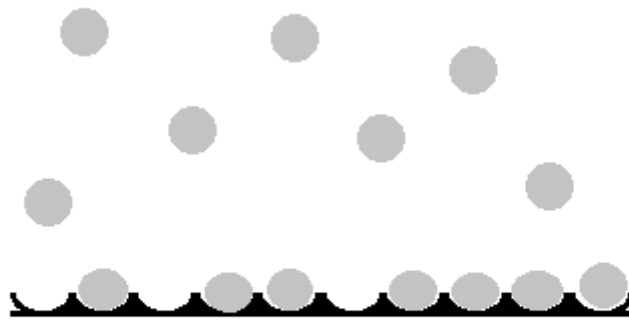


Figura 1 – Esquema representado com superfícies livres e ocupadas em uma superfície com 10 sítios na formação de monocamada.

Na Figura 2, observa-se um esquema de um processo de adsorção, considerando o mesmo segmento, no qual cada sítio pode adsorver mais de uma partícula, tendo assim uma adsorção que representa à formação de multicamadas.

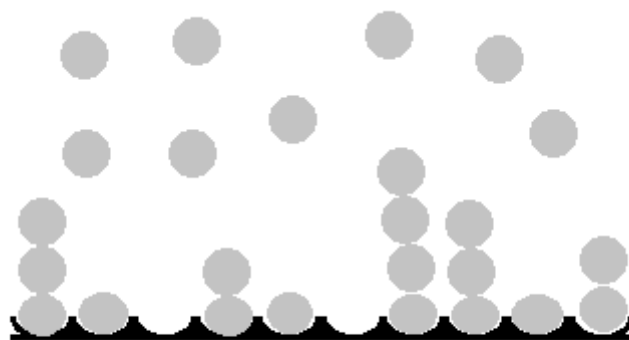


Figura 2 – Esquema representado com superfícies livres e ocupadas em uma superfície com 10 sítios na formação de multicamadas.

O termo “adsorção” trata-se do processo no qual as moléculas se acumulam na camada interfacial e dessorção denota o processo inverso segundo [Dabrowski \(2001\)](#). A adesão das partículas, átomos e moléculas à superfície do adsorvente pode ocorrer por duas formas distintas, adsorção física ou fisiossorção e adsorção química ou quimiossorção. [Dabrowski \(2001\)](#), define adsorção física e química, respectivamente como

Definição 11. *A adsorção física é a que acontece por meio de forças físicas, geralmente ocorre por meio de forças de Van der Waals.*

Definição 12. *Na adsorção química o processo ocorre por forças químicas, as moléculas ou átomos aderem-se à superfície através de ligações químicas que normalmente são covalentes.*

Na adsorção física, apesar de ligações intermoleculares, os átomos ou moléculas se aderem à superfície por uma atração fraca. Além disso é um processo reversível. Em ligações químicas, existe uma forte ligação da molécula adsorvida à superfície e o processo é irreversível desde que não haja uma quantidade relativamente grande de energia.

A adsorção física pode ocorrer em todas as superfícies desde que as condições de temperatura e a pressão sejam favoráveis. Já a adsorção química ocorre apenas entre determinados adsorventes e se, somente se, a superfície não tiver moléculas previamente adsorvidas. Assim, na adsorção química se forma uma única camada molecular adsorvida (monocamada), ao contrário da adsorção física que, sob condições apropriadas, pode resultar na formação de camadas moleculares sobrepostas (multicamadas).

O modelo básico utilizado para a adsorção é o modelo da adsorção sequencial aleatória (ASA) que, segundo [Evans \(1993\)](#), tem sido utilizado em estudos de reações em cadeias de polímeros, quimiossorção em superfícies monocristalinas, adsorção em sistemas

coloidais e transformações em estado sólido. Nesse tipo de adsorção, a probabilidade de adsorção é a mesma, ou seja, as partículas são adsorvidas de maneira aleatória e independente da quantidade de partículas já adsorvidas nos estados vizinhos.

De acordo com [Evans \(1993\)](#), o modelo da adsorção sequencial cooperativo (ASC), é por vezes mais apropriado e pode exibir uma cinética mais rica e uma estrutura espacial. Na ASC o destino da partícula a ser adsorvida é afetado pela vizinhança de cada sítio. Seja, por exemplo, uma cadeia de Markov $X(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t), \dots)$ pode-se definir

$$U_k(t) = \sum_{y \in u(k)} \xi_y(t), \quad (1.17)$$

A quantidade $U_k(t)$ é chamada de potencial do sítio k no tempo t e $u(k)$ é uma vizinhança do sítio k . [Shcherbakov e Volkov \(2010\)](#), consideram três possibilidades para se obter a vizinhança $u(k)$:

(A1) Modelo de não interação

$$u(k) = \{k\}$$

.

(A2) Modelo de interação assimétrica

$$u(k) = \{k, k + 1\}$$

.

(A3) Modelo de interação simétrica

$$u(k) = \{k - 1, k, k + 1\}$$

.

O processo de crescimento descrito acima descreve adsorção de partículas nos sítios, e $\xi_k(t)$ representa o número de partículas adsorvidas no sítio k em um tempo t .

[Shcherbakov e Volkov \(2010\)](#), estudaram a estabilidade de um processo de crescimento considerando o modelo ASC, com taxa de transição igual à $\beta^{U_i(t)}$, em que U_i é o potencial do sítio i , com um número de sítios finitos $i = 1, 2, \dots, N + 1$. O estudo foi feito considerando as três diferentes possibilidades de vizinhança e diferentes valores de β . Considerando $\zeta_i(t) = \xi_i(t) - \xi_{N+1}(t)$, $i = 1, 2, \dots, N$, que também é uma cadeia de Markov, denominada processo de diferenças, os autores definem estabilidade como

Definição 13. *O processo de crescimento é instável se o processo de diferenças é uma cadeia de Markov (recorrente positiva) ergódica. Caso contrário, o processo é considerado não instável.*

A partir da definição [Shcherbakov e Volkov \(2010\)](#), obtêm três importantes teoremas:

Teorema 1.3.1. *Suponha $u(i) = \{i\}$, com $i = 1, 2, \dots, N + 1$.*

(1) *Se $0 < \beta < 1$, então a cadeia de Markov $(\zeta(t), t \in \mathbb{Z}_+)$ é ergódica.*

(2) *Se $\beta > 1$, então a cadeia de Markov $(\zeta(t), t \in \mathbb{Z}_+)$ é transiente.*

Teorema 1.3.2. *Seja $u(i) = \{i, i + 1\}$, $i = 1, \dots, N + 1$, então se $N = 2$ e $0 < \beta < 1$ a cadeia de Markov $(\zeta(t), t \in \mathbb{Z}_+)$ é ergódica.*

Teorema 1.3.3. *Seja $u(i) = \{i - 1, i, i + 1\}$, $i = 1, \dots, N + 1$. Então a cadeia de Markov $(\zeta(t), t \in \mathbb{Z}_+)$ é transiente se $N \geq 3$ e $\beta \in (0, 1) \cup (1, \infty)$, além disso, Se $\beta \geq 1$ então com probabilidade 1 existe $k \in \{1, \dots, N + 1\}$ tal que*

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \xi_i(t) = \infty$$

se e somente se $i \in \{k - 1, k\}$ e

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\xi_k(t)}{\xi_{k-1}(t)} = \beta^c,$$

em que $c = \lim_{t \rightarrow \infty} [\xi_{k+1}(t) - \xi_k(t)] \in \mathbb{Z}$.

Por esses teoremas pode se garantir a instabilidade de um processo de crescimento com um número de sítios finito. Já o estudo da estrutura assintótica da configuração formada pela adsorção de partículas quando o tempo aumenta é um problema típico dos modelos de urnas, em particular, o modelo está diretamente relacionado com o modelo de urnas de Polya. No modelo geral de urna de Polya bolas coloridas são adicionadas em uma urna e é retirada aleatoriamente uma bola da urna, essa bola é retornada à urna juntamente com outra bola adicional da mesma cor da bola sorteada.

No modelo de crescimento correspondente à adsorção de partículas, cada sítio i em que as partículas podem ser adsorvidas corresponde à i cores diferente das bolas que estão na urna e a probabilidade de escolha de cada cor de bola, assim como a probabilidade do sítio adsorver a partícula é proporcional à Γ_i .

[Costa et al. \(2018\)](#) realizou um estudo de um modelo probabilístico que descreve uma alocação sequencial de partículas em um grafo de ciclo finito. Na próxima seção será considerado um processo de crescimento, também pelo modelo de adsorção sequencial cooperativa, considerando um número infinito de sítios.

2 Modelos e Resultados

Este capítulo apresenta a descrição do modelo do processo de adsorção, bem como as notações e os resultados obtidos.

2.1 Descrição do modelo

Considerando $X(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t), \dots)$ um processo de crescimento em tempo contínuo sobre \mathbb{N} e adaptado à filtração $\mathcal{F}(t) = \sigma(X(s), s \leq t)$ em que, $\xi_1(0) = 1$ e para $j > 1$ $\xi_j(0) = 0$. Definimos, para a configuração $X(t) = x = (\xi_1, \xi_2, \dots) \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$, tal que $\sum \xi_i < \infty$, a taxa com que cada partícula é alocada em um sítio i por

$$\Gamma_i(x) := \begin{cases} f(\lambda_i, U_i(x)), & U_i(x) \neq 0 \\ 0, & U_i(x) = 0 \end{cases} \quad (2.1)$$

em que $\lambda_i > 0$ para todo i e U_i é definido como no modelo de interação simétrica de [Shcherbakov e Volkov \(2010\)](#), ou seja,

$$U_i = \begin{cases} \xi_{i-1} + \xi_i + \xi_{i+1}, & i > 1 \\ \xi_1 + \xi_2, & i = 1 \end{cases} \quad (2.2)$$

A quantidade $U_i(x)$ é o potencial do sítio i dada a configuração x . A probabilidade do sítio i adsorver a próxima partícula esta relacionada com o potencial do sítio, o que caracteriza um processo de crescimento com interação cooperativa.

Sejam $\omega_1, \omega_2, \dots$ os momentos de transição:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \inf\{t, X(t) \neq X(0)\} \\ \omega_2 &= \inf\{t > \omega_1, X(t) \neq X(\omega_1)\} \\ \omega_3 &= \inf\{t > \omega_2, X(t) \neq X(\omega_2)\} \\ &\vdots \\ \omega_n &= \inf\{t > \omega_{n-1}, X(t) \neq X(\omega_{n-1})\} \\ &\vdots \end{aligned}$$

A matriz de transição da cadeia imersa P é dada por

$$P_{xy} = \begin{cases} \frac{\Gamma_i(x)}{\sum_{j=1}^{\infty} \Gamma_j(x)}, & \text{se } y = x + e_i, \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}, \quad (2.3)$$

em que $e_i = (\xi_1, \xi_2, \dots)$ com $\xi_i = 1$ e $\xi_j = 0$ para todo $j \neq i$ e $\sum_{j=1}^{\infty} \Gamma_j(x) < \infty$, já que há um número finito de partículas na configuração x .

A partir do modelo é possível obter resultados sobre a estrutura assintótica da configuração formada pela adsorção das partículas. Para apresentar os resultados, é necessário antes definir os seguintes eventos

$$A_t^I := \{ \text{no tempo } t \text{ uma partícula é alocada em } I \}, \quad (2.4)$$

em que $t \in \mathbb{R}_+$ e $I \subset \{1, 2, \dots\}$.

$$A_{[t_1, t_2]}^i = \bigcap_{t=t_1}^{t_2} A_t^i. \quad (2.5)$$

Assim, o evento $A_{[t, \infty)}^i$ significa que a partir do tempo t todas as partículas são adsorvidas somente pelo sítio i . Outra definição importante e utilizada em algumas das demonstrações é a de e_i que é um vetor que recebe o valor 1 na posição i e 0 nas demais.

2.2 Taxas exponenciais

A taxa exponencial com que cada partícula é alocada em um sítio i pode ser definida, considerando a configuração $X(t) = x = (\xi_1, \xi_2, \dots) \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$, como

$$\Gamma_i(x) := \begin{cases} e^{\lambda_i U_i(x)}, & U_i(x) \neq 0 \\ 0, & U_i(x) = 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

em que $\lambda_i > 0$ para todo i e U_i é definido como em (2.2).

Um resultado importante que será apresentado é que o evento $A_{[t, \infty)}^i$ ocorre quase certamente para um t e um determinado sítio i . Considerando $M \subset \{1, 2, \dots\}$ o conjunto de máximos locais da função $i \rightarrow \lambda_i$ será visto que esse sítio i será sempre algum sítio em M , dependendo apenas da configuração inicial x . E ainda, como o tempo é contínuo, é necessário verificar se ocorre ou não explosão.

2.2.1 Explosão

A sequência dos momentos de transição aleatórios pode também ser escrita como $\omega_0 := 0$ e $\omega_n := \sum_{j=1}^n \sigma_j$, em que σ_n é o tempo entre alocação de partículas com distribuição exponencial. Considerando $\zeta = \lim_{n \rightarrow \infty} \omega_n$, dessa forma se $\zeta < \infty$, então são adsorvidas infinitas partículas em um tempo finito, portanto ocorre explosão. Se $\zeta = \infty$, então infinitas partículas são adsorvidas somente em um tempo infinito, e nesse caso não ocorre explosão. O resultado apresentado abaixo, garante a ocorrência de explosão no modelo exponencial apresentado.

Teorema 2.2.1. *Para todo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$ tem-se que $\zeta < \infty$.*

2.2.2 Taxas decrescentes

Seja a função $i \rightarrow \lambda_i$ decrescente, então $M = 1$. Dessa forma o próximo teorema garante que a partir de um certo tempo as partículas serão adsorvidas apenas no primeiro sítio.

Antes de enunciar o teorema é necessário considerar a próxima hipótese,

Hipótese 1. *Para toda configuração x existe N tal que $\mathbb{P}_x(\exists j : \mathbb{P}_x(A_{\omega_N}^j) > \delta) > \varepsilon$.*

Outra hipótese equivalente seria que considerando uma configuração inicial x as próximas partículas serão adsorvidas até um sítio $S < \infty$, que pode ser apresentada como

Hipótese 2. *Seja $\lambda_i > \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots\}$ então existe quase certamente um sítio aleatório S tal que nenhum sítio $l > S$ adsorve partículas.*

Uma ideia da demonstração das hipóteses pode ser encontrado nos anexos.

Teorema 2.2.2. *Se $\lambda_i > \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots\}$, então para todo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$*

$$P_x[\exists n^* \in \mathbb{Z}_+ : A_{[\omega_{n^*}, \infty)}^1] = 1.$$

2.2.3 Taxas crescentes

O próximo resultado garante que se $\lambda_i < \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots\}$ a partir de um tempo as partículas são adsorvidas por sítios subsequentes. Sabe-se que ocorre explosão como visto no Teorema 2.2.1, portanto o próximo teorema permite concluir que quando função a $i \rightarrow \lambda_i$ é crescente ocorre explosão horizontal.

Teorema 2.2.3. *Se $\lambda_i < \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, 3, \dots\}$ então todo sítio $j \in \{1, 2, \dots\}$ adsorve quase certamente uma quantidade finita de partículas.*

2.2.4 Caso geral

O próximo resultado garante que a partir de um certo tempo as partículas serão adsorvidas apenas em um sítio $m \in M$.

Teorema 2.2.4. *Se $\lambda_i \neq \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots\}$ e $M \neq \emptyset$, então para todo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$ existe um sítio aleatório $m \in M$ tal que*

$$P_x[\exists n^* \in \mathbb{Z}_+ : A_{[\omega_{n^*}, \infty)}^m] = 1.$$

Para a demonstração do Teorema 2.2.4, assim como no caso em que as taxas são decrescentes, é necessário supor que considerando uma configuração inicial x as próximas partículas serão adsorvidas até um sítio $S < \infty$, como pode ser descrito na próxima hipótese

Hipótese 3. *Seja $\lambda_i \neq \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots\}$ então existe quase certamente um sítio aleatório s tal que nenhum sítio $l > s$ adsorve partículas.*

Uma ideia da demonstração da Hipótese 3 está em anexos.

2.3 Taxas polinomiais

Definimos a taxa polinomial com que cada partícula é alocada em um sítio i , considerando a configuração $X(t) = x = (\xi_1, \xi_2, \dots) \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$, como

$$\Gamma_i(x) := \begin{cases} (\lambda_i U_i(x))^\alpha, & U_i(x) \neq 0 \\ 0, & U_i(x) = 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

em que $\alpha \in \mathbb{N}$, $\lambda_i > 0$ para todo i e U_i é definido como em (2.2).

2.3.1 Explosão

O resultado apresentado abaixo, garante a ocorrência de explosão no modelo polinomial apresentado quando $\alpha \geq 2$, ou seja, avalia se $\zeta < \infty$, em que $\zeta = \lim_{n \rightarrow \infty} \omega_n$. Além disso, o teorema garante a ocorrência de explosão para um modelo de taxa polinomial com λ constante para todo i quando $\alpha \geq 2$ e a ocorrência de não explosão quando $\alpha \leq 1$.

Teorema 2.3.1. *Seja $\Gamma_i = (\lambda_i U_i(x))^\alpha$, em que $U_i(x) > 0$, $\alpha \in \mathbb{N}$ e $\lambda_i > 0$, a taxa com que a partícula é adsorvida pelo sítio i , então*

(i) *Se $\alpha \geq 2$ tem-se que $\zeta < \infty$ para todo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$.*

- (ii) Se $\alpha \geq 2$ e λ é constante tem-se que $\zeta < \infty$ para todo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$.
- (iii) Se $0 < \alpha \leq 1$ e λ é constante tem-se que $\mathbb{P}_x(\zeta = +\infty) = 1$ para todo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$.

2.4 Taxas logarítmicas

Para a configuração $X(t) = x = (\xi_1, \xi_2, \dots) \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$, definimos a taxa logarítmica com que cada partícula é alocada em um sitio i por

$$\Gamma_i(x) := \begin{cases} \ln(U_i(x) + 1), & U_i(x) \neq 0 \\ 0, & U_i(x) = 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

em que U_i é definido como em (2.2).

2.4.1 Explosão

O próximo resultado garante a não ocorrência de explosão quando as taxas com que cada partícula é adsorvida são logarítmicas.

Teorema 2.4.1. *Para todo $x \in \mathbb{X}$ tem-se que $\mathbb{P}_x(\zeta = +\infty) = 1$.*

3 Lemas

Para a demonstração do Teorema 2.2.2, é necessário verificar que a partir de uma configuração inicial x , com probabilidade de cair no sítio 1 positiva, então a probabilidade das próximas partículas serem adsorvidas somente pelo sítio 1 também será positiva e não dependente de x .

Lema 3.0.1. *Suponha $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$ e $\Lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots)$, tal que $P_x(A_{\omega_1}^1) \geq \delta$ para algum $\delta \in (0, 1)$ e $\lambda_{i-1} > \lambda_i$ para todo i , então existe $\varepsilon_1 = \varepsilon_1(\Lambda, \delta) > 0$, não dependente de x , tal que*

$$P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^1] \geq \varepsilon_1.$$

Se a partir de uma configuração inicial x o sítio 1 apresentar probabilidade nula de adsorver a primeira partícula, então existe um sítio $j \neq 1$ que possui probabilidade positiva de adsorver essa partícula e é possível mostrar que esse sítio tem probabilidade positiva de adsorver um número finito de partículas e a partir de um momento o sítio $j - 1$ passa a ter probabilidade de adsorção maior do que o sítio j . Esse resultado garante que a partir de um momento o sítio 1 terá probabilidade positiva de adsorver a partícula e continuar adsorvendo todas as próximas partículas de acordo com o Teorema 2.2.2.

Lema 3.0.2. *Seja $\lambda_i > \lambda_{i+1}$ para todo $i \in \{1, 2, \dots\}$, $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$ e $j \in \{1, 2, \dots\}$ tal que $P_x[A_{\omega_1}^j] \geq \delta$, então existem $n_j = n_j(x, \Lambda)$ e $\varepsilon_j = \varepsilon_j(\delta, \Lambda)$ não dependente de x tal que*

$$(i) \quad P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \varepsilon_j.$$

$$(ii) \quad \text{Como } \lambda_{i-1} > \lambda_i > \lambda_{i+1}, n_j \text{ é o menor inteiro positivo tal que } P_x[A_{\omega_{n_j}}^{j-1} \mid A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \\ P_x[A_{\omega_{n_j}}^j \mid A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \text{ e } P_x[A_{\omega_{n_j}}^{j-1} \mid A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \frac{\delta}{2}$$

Para demonstrar o Teorema 2.2.4 são necessários os próximos lemas

Lema 3.0.3. *Suponha $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$ e $\Lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots)$, tal que $P_x(A_{\omega_1}^m) \geq \delta$ para algum $\delta \in (0, 1)$ e $m \in M$, então existe $\varepsilon_m = \varepsilon_m(\Lambda, \delta) > 0$ não dependente de x tal que*

$$P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^m] \geq \varepsilon_m.$$

Lema 3.0.4. *Seja $j \in \{1, 2, \dots\}$ tal que $\min(\lambda_{j-1}, \lambda_{j+1}) < \lambda_j < \max(\lambda_{j-1}, \lambda_{j+1})$. Suponha $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$, tal que $P_x[A_{\omega_1}^j] \geq \delta$ para algum $\delta \in (0, 1)$, então existem $n_j = n_j(x, \Lambda)$ e $\varepsilon_j = \varepsilon_j(\delta, \Lambda)$ não dependente de x tal que*

$$P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \varepsilon_j .$$

Lema 3.0.5. *Seja $j \in \{1, 2, \dots\}$ um mínimo local. Supondo $x \in \mathbb{Z}_+^{\mathbb{N}}$ tal que $P_x[A_{\omega_1}^j] \geq \delta$ para algum $\delta \in (0, 1)$, então existe um número inteiro positivo $n_j(x, \Lambda)$ e $\varepsilon = \varepsilon(\Lambda, \delta) > 0$ não dependente de x tal que*

$$P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \varepsilon \quad e \quad \max_{i=j \pm 1} P_x[A_{\omega_{n_j}}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \frac{\delta}{2} .$$

4 Demonstrações dos Resultados

4.1 Demonstração do Teorema 2.2.1

Demonstração. Para verificar a ocorrência de explosão quando a taxa de adsorção é exponencial será utilizado o Teorema 1.2.1. Além disso sem perda de generalidade será considerado a configuração x com pelo menos uma partícula no sítio 1 ou no sítio 2 e a seguinte função

$$f(x) = \frac{1}{e^{\lambda_1 U_1(x)}} \quad (4.1)$$

em que

$$U_i = \begin{cases} \xi_{i-1} + \xi_i + \xi_{i+1}, & i > 1 \\ \xi_1 + \xi_2, & i = 1 \end{cases} \quad (4.2)$$

Assim,

$$\begin{aligned} \Gamma f(x) &= \sum_{y \in \mathbb{X}} \Gamma_{xy} f(y) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) + \Gamma_{xx} f(x) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) - \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(x) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} (f(y) - f(x)) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \Gamma_{x, x+e_i} (f(x+e_i) - f(x)) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} e^{\lambda_i U_i(x)} \left(\frac{1}{e^{\lambda_1 U_1(x+e_i)}} - \frac{1}{e^{\lambda_1 U_1(x)}} \right) \end{aligned} \quad (4.3)$$

Se a partícula cair fora da vizinhança do sítio 1 então $U_1\{x+e_i\} = U_1\{x\}$, já se a partícula cair na vizinhança do sítio 1 então $U_1\{x+e_i\} = U_1\{x\} + 1$. Logo

$$\begin{aligned} \Gamma f(x) &= \sum_{i=1}^2 e^{\lambda_i U_i(x)} \left(\frac{1}{e^{\lambda_1 (U_1(x)+1)}} - \frac{1}{e^{\lambda_1 U_1(x)}} \right) \\ &= e^{\lambda_1 U_1(x)} e^{-\lambda_1 U_1(x)} (e^{-\lambda_1} - 1) + e^{\lambda_2 U_2(x)} e^{-\lambda_1 U_1(x)} (e^{-\lambda_1} - 1) \\ &= (e^{-\lambda_1} - 1) (1 + e^{(\lambda_2 U_2(x) - \lambda_1 U_1(x))}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Portanto, como a configuração inicial sempre tem uma partícula no sítio 1, existe $\varepsilon > 0$ tal que $\Gamma f(x) < -\varepsilon$ e pelo Teorema 1.2.1 ocorre explosão. \square

4.2 Demonstração do Teorema 2.2.2

Demonstração. Sejam $T \leq \omega_n \leq \omega_{n_j} \leq \omega_{n_{j-1}} \leq \dots$, e o evento

$$B_j(T) = A_{(T, \omega_{n_j})}^j \cap A_{[\omega_{n_j}, \omega_{n_{j-1}})}^{j-1} \cap \dots \cap A_{[\omega_{n_3}, \omega_{n_2})}^2 \cap A_{[\omega_{n_2}, \infty)}^1. \quad (4.5)$$

Seja $\omega_{n-1} \leq T_0$ e seja j_0 o estado em que

$$P[A_{\omega_n}^{j_0} \mid X(T_0) = x_0] \geq \max_{i \in \{1, 2, \dots\}} P[A_{\omega_n}^i \mid X(T_0) = x_0]. \quad (4.6)$$

Então para cada j_0 , considerando os Lemas 3.0.1 e 3.0.2, segue que

$$\begin{aligned} P[B_{j_0}(T) \mid X(T) = x_0] &= P[A_{(T, \omega_{n_{j_0}})}^{j_0} \cap A_{[\omega_{n_{j_0}}, \omega_{n_{j_0-1}})}^{j_0-1} \cap \dots \cap A_{[\omega_{n_3}, \omega_{n_2})}^2 \cap A_{[\omega_{n_2}, \infty)}^1] \\ &\geq \prod_{k=1}^{j_0} \varepsilon_k(\delta, \Lambda) \\ &> 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

Começando em um tempo qualquer T_0 com $X(T_0) = x_0$ e considerando $T_k := \min\{n > T_{k-1} : B_{j_{k-1}}(T_{k-1}) \text{ não ocorre}\}$, a última desigualdade implica que

$$P[T_k = \infty \mid \mathcal{F}_{T_{k-1}}] \geq \varepsilon, \text{ em que } \{T_{k-1} < \infty\}. \quad (4.8)$$

Assim,

$$P[T_k < \infty \mid \mathcal{F}_{T_{k-1}}] \leq 1 - \varepsilon, \text{ em que } \{T_{k-1} < \infty\}. \quad (4.9)$$

Seja $L := \max\{k \geq 0 : T_k < \infty\}$, então

$$P[L \geq k \mid L \geq k-1] \leq 1 - \varepsilon, \quad (4.10)$$

o que implica que

$$P[L < \infty] = 1. \quad (4.11)$$

Assim $T_k = \infty$ para algum k . Portanto,

$$P_x[\exists n^* \in \mathbb{Z}_+ : A_{[n^*, \infty)}^1] = 1. \quad (4.12)$$

□

4.3 Demonstração do Teorema 2.2.3

Demonstração. Para a demonstração do Teorema 2.2.3 será utilizado o teorema apresentado por Costa et al. (2018)

Teorema 4.3.1. *Seja $x \in \mathbb{Z}_+^N$ então existe um sítio $k \in M$ tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_i(n) = \infty$ se e somente se $i = k$.*

Supondo que as partículas estão sendo adsorvidas até um sítio s , pelo Teorema 4.3.1 pode-se afirmar que a partir de um número de partículas adsorvidas pelos sítios $\{1, 2, \dots, s\}$ os sítios de 1 à $s - 1$ não mais adsorvem as próximas partículas, ou seja, apenas os sítio s adsorve as próximas partículas e já que $\lambda_j < \lambda_{j+1}$ então $e^{\lambda_j(U_j(x)+n)} \leq e^{\lambda_{j+1}(U_{j+1}(x)+n)}$ para algum n e então

$$P_x[A_{\omega_n}^{s+1} \mid A_{[\omega_1, \omega_n]}^j] \geq P_x[A_{\omega_n}^s \mid A_{[\omega_1, \omega_n]}^j], \quad (4.13)$$

em que x é a configuração das partículas que foram adsorvidas até que os sítios de 1 à $s - 1$ não mais adsorve. Assim

$$\max\{\max_i e^{\lambda_i U_i(x)}, e^{\lambda_{s-1}(U_{s-1}(x)+n)}\} \leq e^{\lambda_s(U_s(x)+n)} \leq e^{\lambda_{s+1}(U_{s+1}(x)+n)}. \quad (4.14)$$

Portanto,

$$P_x[A_{\omega_n}^{s+1} \mid A_{[\omega_1, \omega_n]}^s] = \max_i P_x[A_{\omega_n}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_n]}^s]. \quad (4.15)$$

Alem disso,

$$P_x[A_{\omega_n}^{s+1} \mid A_{[\omega_1, \omega_n]}^s] > \varepsilon, \quad (4.16)$$

logo

$$P_x[A_{\omega_n}^s \mid A_{[\omega_1, \omega_n]}^s] \leq 1 - \varepsilon. \quad (4.17)$$

Seja $L := \max\{n > 1 : A_{\omega_n}^s\}$, então

$$P_x[L \geq n \mid L \geq n - 1] \leq 1 - \varepsilon. \quad (4.18)$$

Implicando que

$$P_x[L < \infty] = 1. \quad (4.19)$$

Portanto

$$P_x[\exists n^* \in \mathbb{Z}_+ : A_{\omega_{n^*}}^{s+1}] = 1. \quad (4.20)$$

Portanto, para cada sítio j existe uma quantidade aleatória de partículas n_j tal que, com probabilidade 1, depois de adsorvidas as n_j partículas o sítio j não adsorve mais nenhuma.

□

4.4 Demonstração do Teorema 2.2.4

Demonstração. Seja T um tempo qualquer em \mathbb{N} e os seguintes casos

- (i) Seja j um sítio tal que $\lambda_{j-1} < \lambda_j < \lambda_{j+1} < \dots < \lambda_m$ m é primeiro máximo sítio a direita de j e $T \leq \omega_n \leq \omega_{n_j} \leq \omega_{n_{j+1}} \leq \dots \leq \omega_{n_{m-1}}$ assim definimos o seguinte evento

$$B_j(T) := A_{(T, \omega_{n_j})}^j \cap A_{[\omega_{n_j}, \omega_{n_{j+1}})}^{j+1} \cap \dots \cap A_{[\omega_{n_{m-2}}, \omega_{n_{m-1}})}^{m-1} \cap A_{[\omega_{n_{m-1}}, \infty)}^m. \quad (4.21)$$

- (ii) Seja j um sítio tal que $\lambda_{j+1} < \lambda_j < \lambda_{j-1} < \dots < \lambda_m$ m é primeiro máximo sítio à esquerda de j e $T \leq \omega_n \leq \omega_{n_j} \leq \omega_{n_{j-1}} \leq \dots \leq \omega_{n_{m+1}}$ assim definimos o seguinte evento

$$B_j(T) := A_{(T, \omega_{n_j})}^j \cap A_{[\omega_{n_j}, \omega_{n_{j-1}})}^{j-1} \cap \dots \cap A_{[\omega_{n_{m+2}}, \omega_{n_{m+1}})}^{m+1} \cap A_{[\omega_{n_{m+1}}, \infty)}^m. \quad (4.22)$$

- (iii) Seja j um máximo local então

$$B_j(T) = A_{(T, \infty)}^j \quad (4.23)$$

Seja $\omega_{n-1} \leq T_0$ e seja j_0 o estado em que

$$P[A_{\omega_n}^{j_0} \mid X(T_0) = x_0] \geq \max_{i \in \{1, 2, \dots\}} P[A_{\omega_n}^i \mid X(T_0) = x_0] \quad (4.24)$$

Então para cada j_0 , considerando os Lemas 3.0.3, 3.0.4 e 3.0.5 segue que

$$P[B_{j_0}(T) \mid X(T) = x_0] \geq \prod_{k=j_0}^m \varepsilon_k(\delta, \Lambda) > 0 \quad (4.25)$$

Começando em um tempo qualquer T_0 com $X(T_0) = x_0$ e considerando $T_k := \min\{n > T_{k-1} : B_{j_{k-1}}(T_{k-1}) \text{ não ocorre}\}$

A última desigualdade implica que

$$P[T_k = \infty \mid \mathcal{F}_{T_{k-1}}] \geq \varepsilon \text{ em } \{T_{k-1} < \infty\} \quad (4.26)$$

Assim

$$P[T_k < \infty \mid \mathcal{F}_{T_{k-1}}] \leq 1 - \varepsilon \text{ em } \{T_{k-1} < \infty\} \quad (4.27)$$

Seja $L := \max\{k \geq 0 : T_k < \infty\}$, então

$$P[L \geq k \mid L \geq k-1] \leq 1 - \varepsilon, \quad (4.28)$$

o que implica que

$$P[L < \infty] = 1 \quad (4.29)$$

assim $T_k = \infty$ para algum k .

Então \forall sitio aleatório m

$$P_x[\exists n^* \in \mathbb{Z}_+ : A_{[n^*, \infty)}^m] = 1$$

□

4.5 Demonstração do Teorema 2.3.1

Demonstração. (i) Utilizamos o Teorema 1.2.1 para verificar a ocorrência de explosão quando a taxa de adsorção é polinomial. Assim como para as taxas de adsorção exponencial sem perda de generalidade será considerado a configuração x com pelo menos uma partícula no sítio 1 ou no sítio 2 e a seguinte função

$$f(x) = \frac{1}{U_1(x)} \quad (4.30)$$

em que

$$U_i = \begin{cases} \xi_{i-1} + \xi_i + \xi_{i+1}, & i > 1 \\ \xi_1 + \xi_2, & i = 1 \end{cases} \quad (4.31)$$

Então,

$$\begin{aligned} \Gamma f(x) &= \sum_{y \in \mathbb{X}} \Gamma_{xy} f(y) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) + \Gamma_{xx} f(x) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) - \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(x) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} (f(y) - f(x)) \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \Gamma_{x, x+e_i} (f(x+e_i) - f(x)) \end{aligned}$$

$$= \sum_{i=1}^{\infty} (\lambda_i U_i(x))^\alpha \left(\frac{1}{U_1(x + e_i)} - \frac{1}{U_1(x)} \right). \quad (4.32)$$

Se a partícula cair fora da vizinhança do sítio 1 então $U_1\{x + e_i\} = U_1\{x\}$, já se a partícula cair na vizinhança do sítio 1 então $U_1\{x + e_i\} = U_1\{x\} + 1$. Logo

$$\begin{aligned} \Gamma f(x) &= \sum_{i=1}^2 (\lambda_i U_i(x))^\alpha \left(\frac{1}{U_1(x) + 1} - \frac{1}{U_1(x)} \right) \\ &= -\frac{\lambda_1^\alpha U_1(x)}{U_1(x)^2 + U_1(x)} - \frac{\lambda_2^\alpha U_2(x)}{U_1(x)^2 + U_1(x)} \\ &\leq -\frac{\lambda_1^\alpha U_1(x)^\alpha}{U_1(x)^2 + U_1(x)} \\ &\leq -\frac{\lambda_1^\alpha}{2}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Portanto, como a configuração inicial sempre tem uma partícula no sítio 1, existe $\varepsilon > 0$ tal que $\Gamma f(x) < -\varepsilon$ para todo $x \in \mathbb{X}$ e pelo Teorema 1.2.1 ocorre explosão.

(ii) A ocorrência de explosão pode ser verificada da mesma forma que o item (i) considerando sem perda de generalidade $\lambda_i = 1$ para todo i e utilizando o Teorema 1.2.1.

(iii) Considerando sem perda de generalidade $\lambda_i = 1$ e seja $f(x)$ definido como

$$f(x) = \frac{\sum_1^\infty U_i(x)}{3}, \quad (4.34)$$

em que x é uma configuração com finitas partículas. O item 1 do Teorema 1.2.3 é satisfeito, já que $f \rightarrow \infty$. Seja $g : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ definida como

$$g(y) := 3y + \sqrt{y}. \quad (4.35)$$

Portanto $g(y)$ satisfaz as condições do item 2 do Teorema 1.2.3. De fato,

$$G(z) = \int_0^z \frac{dy}{g(y)} = \int_0^z \frac{dy}{3y + \sqrt{y}} = \frac{2}{3} \ln(3\sqrt{z} + 1) < +\infty, \quad (4.36)$$

para todo $z \in \mathbb{R}_+$ e além disso $\lim_{z \rightarrow \infty} G(z) = \lim_{z \rightarrow \infty} \frac{2}{3} \ln(3\sqrt{z} + 1) = \infty$.

Logo,

$$\begin{aligned} \Gamma f(x) &= \sum_{y \in \mathbb{X}} \Gamma_{xy} f(y) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) + \Gamma_{xx} f(x) \\ &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) - \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(x) \end{aligned} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} (f(y) - f(x)) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} \Gamma_{x, x+e_i} (f(x+e_i) - f(x)) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} (U_i(x))^\alpha (f(x+e_i) - f(x)), \tag{4.38}
\end{aligned}$$

sabe-se que

$$f(x+e_i) = \begin{cases} f(x) + \frac{2}{3}, & i = 1 \\ f(x) + 1, & i \neq 1 \end{cases}, \tag{4.39}$$

logo,

$$\begin{aligned}
\Gamma f(x) &\leq \sum_{i=1}^{\infty} (U_i(x))^\alpha (f(x) + 1 - f(x)) \\
&= \sum_{i=1}^{\infty} (U_i(x))^\alpha \\
&\leq \sum_{i=1}^{\infty} U_i(x) + \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{\infty} U_i(x)}{3}}, \text{ já que } \alpha \leq 1 \text{ e } U_i(x) \geq 2, \\
&= g(f(x)). \tag{4.40}
\end{aligned}$$

Como $\Gamma f(x) \leq g(f(x))$ para todo $x \in \mathbb{X}$ em que $\alpha \leq 1$ então, pelo Teorema 1.2.3, $\mathbb{P}_x(\zeta = +\infty) = 1$ para todo $x \in \mathbb{X}$, ou seja, não ocorre explosão.

□

4.6 Demonstração do Teorema 2.4.1

Demonstração. Seja $f(x)$ definida como

$$f(x) = \sum_1^{\infty} U_i(x) + 1, \tag{4.41}$$

em que x é uma configuração que contém um número finito de partículas. Dessa forma temos que $f \rightarrow \infty$ satisfazendo o item 1 do Teorema 1.2.3. Seja também $g : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ definida como

$$g(y) := y + \sqrt{y}, \tag{4.42}$$

Assim,

$$G(z) = \int_0^z \frac{dy}{g(y)} = \int_0^z \frac{dy}{y + \sqrt{y}} = 2 \ln(\sqrt{z} + 1) < +\infty, \tag{4.43}$$

para todo $z \in \mathbb{R}_+$ e além disso $\lim_{z \rightarrow \infty} G(z) = \lim_{z \rightarrow \infty} 2 \ln(\sqrt{z} + 1) = \infty$. Portanto $g(y)$ satisfaz as condições do item 2 do Teorema 1.2.3.

Logo,

$$\begin{aligned}
 \Gamma f(x) &= \sum_{y \in \mathbb{X}} \Gamma_{xy} f(y) \\
 &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) + \Gamma_{xx} f(x) \\
 &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(y) - \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} f(x) \\
 &= \sum_{y \in \mathbb{X} \setminus \{x\}} \Gamma_{xy} (f(y) - f(x)) \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \Gamma_{x, x+e_i} (f(x+e_i) - f(x)) \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \ln(U_i + 1) (f(x+e_i) - f(x))
 \end{aligned} \tag{4.44}$$

sabe-se que

$$f(x+e_i) = \begin{cases} f(x) + 2, & i = 1 \\ f(x) + 3, & i \neq 1 \end{cases}, \tag{4.45}$$

assim,

$$\begin{aligned}
 \Gamma f(x) &= \sum_{i=1}^{\infty} \ln(U_i(x) + 1) 3 \\
 &= 3 \sum_{i=1}^{\infty} \ln(U_i(x) + 1) \\
 &\leq \sum_1^{\infty} U_i(x) + 1 + \sqrt{\sum_1^{\infty} U_i(x) + 1} \\
 &= g(f(x)).
 \end{aligned} \tag{4.46}$$

Portanto, como o último item do teorema foi satisfeito, no modelo com taxa de adsorção logarítmica não ocorre explosão de acordo com o Teorema 1.2.3.

□

5 Demonstração dos lemas

5.1 Demonstrações dos Lemas 3.0.1 e 3.0.2

Lema 3.0.1. Seja $\tilde{P}_k^i := P_x[A_{\omega_{k+1}}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^1]$, para $k = 1, 2, \dots$. Então,

$$\begin{aligned} P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^1] &= P_x[A_{\omega_1}^1] \prod_{k=1}^{\infty} P_x[A_{\omega_{k+1}}^1 \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^1] \\ &= P_x[A_{\omega_1}^1] \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \sum_{i \neq 1} \tilde{P}_k^i\right). \end{aligned} \quad (5.1)$$

Seja $\widetilde{\Delta}_k := \sum_{i \neq 1} \tilde{P}_k^i$, pode-se encontrar um limitante superior para $\widetilde{\Delta}_k$ da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\widetilde{\Delta}_k}{\tilde{P}_k^1} &= \frac{\sum_{i \neq 1} \tilde{P}_k^i}{\tilde{P}_k^1} \\ &= \frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus \{1, 2\}} e^{\lambda_i U_i(x)} + e^{\lambda_2(\xi_1 + k + \xi_2 + \xi_3)}}{e^{\lambda_1(\xi_1 + k + \xi_2)}} \\ &= e^{-\lambda_1 k} \frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus \{1, 2\}} e^{\lambda_i U_i(x)}}{e^{\lambda_1(\xi_1 + \xi_2)}} + e^{k(\lambda_2 - \lambda_1)} \frac{e^{\lambda_2(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)}}{e^{\lambda_1(\xi_1 + \xi_2)}} \\ &\leq e^{-k(\lambda_1 - \lambda_2)} \frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus \{1, 2\}} e^{\lambda_i U_i(x)}}{e^{\lambda_1(\xi_1 + \xi_2)}} + e^{k(\lambda_2 - \lambda_1)} \frac{e^{\lambda_2(\xi_1 + \xi_2 + \xi_3)}}{e^{\lambda_1(\xi_1 + \xi_2)}} \\ &= e^{-k(\lambda_1 - \lambda_2)} \left(\frac{\sum_{i \neq 1} P_x(A_{\omega_1}^i)}{P_x(A_{\omega_1}^1)} \right) \\ &\leq e^{-k(\lambda_1 - \lambda_2)} \left(\frac{1 - \delta}{\delta} \right). \end{aligned} \quad (5.2)$$

Combinando a ultima desigualdade com o fato de que $\tilde{P}_k^1 + \widetilde{\Delta}_k = 1$, temos que

$$\begin{aligned} \frac{\widetilde{\Delta}_k}{\tilde{P}_k^1} &\leq e^{-k(\lambda_1 - \lambda_2)} \left(\frac{1 - \delta}{\delta} \right) \Leftrightarrow \frac{1 - \widetilde{\Delta}_k}{\widetilde{\Delta}_k} \geq \frac{\delta e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)}}{1 - \delta} \\ &\Leftrightarrow \frac{1}{\widetilde{\Delta}_k} \geq \frac{\delta e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)} + (1 - \delta)}{1 - \delta} \\ &\Leftrightarrow \widetilde{\Delta}_k \leq \frac{1 - \delta}{\delta e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)} + 1 - \delta} := a_k(\delta, \Lambda). \end{aligned} \quad (5.3)$$

Então,

$$P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^1] \geq \delta \prod_{k=1}^{\infty} (1 - \widetilde{\Delta}_k) \geq \delta e^{\sum_{k=1}^{\infty} \ln(1 - a_k)}. \quad (5.4)$$

Além disso, $0 < a_k(\delta, \Lambda) \leq 1 - \delta$, usando desigualdade da função logarítmica, pode-se encontrar uma constante $C = C(\delta) \in (0, \infty)$ tal que $\ln(1 - a_k) \geq -Ca_k$. Assim,

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{\infty} \ln(1 - a_k) &\geq -C \sum_{k=1}^{\infty} a_k \\
&= -C \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 - \delta}{1 - \delta + \delta e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)}} \\
&= -C(1 - \delta) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{1 - \delta + \delta e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)}} \\
&\geq -C(1 - \delta) \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\delta e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)}} \\
&\geq \frac{-C(1 - \delta)}{\delta} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{e^{k(\lambda_1 - \lambda_2)}} \\
&\geq \frac{-C(1 - \delta)}{\delta} \sum_{k=0}^{\infty} (e^{-(\lambda_1 - \lambda_2)})^k \\
&\geq -\frac{C(1 - \delta)}{\delta} \left(\frac{1}{1 - e^{-(\lambda_1 - \lambda_2)}} \right)
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Portanto de (5.4) temos que

$$P_x[A_{[\omega_1, \infty]}^1] \geq \delta \exp \left\{ -\frac{c(1 - \delta)}{\delta(1 - e^{-(\lambda_1 - \lambda_2)})} \right\} =: \varepsilon_1(\delta, \Lambda) > 0. \tag{5.6}$$

□

Lema 3.0.2. (i) Seja $\widetilde{P}_k^i := P_x[A_{\omega_k}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^j]$. Assim

$$\begin{aligned}
P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j}]}^j] &= P_x[A_{\omega_1}^j] \prod_{k=2}^{n_j-1} \widetilde{P}_k^j \\
&= P_x[A_{\omega_1}^j] \prod_{k=2}^{n_j-1} (1 - \sum_{i \neq j} \widetilde{P}_k^i) \\
&= P_x[A_{\omega_1}^j] \prod_{k=2}^{n_j-1} (1 - (\widetilde{P}_k^{j-1} + \sum_{i \neq \{j-1, j\}} \widetilde{P}_k^i)) \\
&= P_x[A_{\omega_1}^j] \prod_{k=2}^{n_j-1} (1 - (a_k + b_k)).
\end{aligned} \tag{5.7}$$

em que $a_k = \widetilde{P}_k^{j-1}$ e $b_k = \sum_{i \neq \{j-1, j\}} \widetilde{P}_k^i$. Os termos de a_k e b_k podem ser limitados através de algumas manipulações

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{P}_{k-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{k-1}^j} &= \frac{P_x[A_{\omega_{k-1}}^{j-1} \mid A_{[\omega_1, \omega_{k-1}]}^j]}{P_x[A_{\omega_{k-1}}^j \mid A_{[\omega_1, \omega_{k-1}]}^j]} \\
&= \frac{\Gamma_{j-1}(y)}{\Gamma_j(y)} \\
&= \frac{e^{\lambda_{j-1}(\xi_{j-2} + \xi_{j-1} + \xi_j + (k-2))}}{e^{\lambda_j(\xi_{j-1} + \xi_j + (k-2) + \xi_{j+1})}} \\
&= \frac{e^{\lambda_{j-1}(U_{j-1} + (k-1))} e^{-\lambda_{j-1}}}{e^{\lambda_j(U_j + (k-1))} e^{-\lambda_j}} \\
&= \frac{\tilde{P}_k^{j-1}}{\tilde{P}_k^j} e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)}, \tag{5.8}
\end{aligned}$$

com $k = 3, \dots, n_{j-1}$. Então,

$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} + \frac{\tilde{P}_{n_j-2}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-2}^j} + \dots + \frac{\tilde{P}_2^{j-1}}{\tilde{P}_2^j} &= \frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} + \frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)} + \dots + \frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)(n_j-3)} \\
&= \frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} \left(\sum_{k=0}^{n_j-3} e^{-k(\lambda_{j-1} - \lambda_j)} \right) \\
&\leq \frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} \frac{1}{1 - e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)}} \\
&\leq \frac{1}{1 - e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)}}. \tag{5.9}
\end{aligned}$$

Assim, pode-se limitar a soma de a_k

$$\sum_{k=2}^{n_j-1} a_k = \tilde{P}_{n_j-1}^{j-1} + \tilde{P}_{n_j-2}^{j-1} + \dots + \tilde{P}_2^{j-1} \leq \frac{\tilde{P}_{n_j-1}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} + \frac{\tilde{P}_{n_j-2}^{j-1}}{\tilde{P}_{n_j-2}^j} + \dots + \frac{\tilde{P}_2^{j-1}}{\tilde{P}_2^j} \leq \frac{1}{1 - e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)}}. \tag{5.10}$$

Manipulando b_k de maneira análoga,

$$\begin{aligned}
\frac{b_k}{\tilde{P}_k^j} &= \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j\}} \tilde{P}_k^i}{\tilde{P}_k^j} \\
&= \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} \tilde{P}_k^i + \tilde{P}_k^{j+1}}{\tilde{P}_k^j} \\
&= \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} P_x[A_k^i \mid A_{[1, k]}^j] + P_x[A_k^{j+1} \mid A_{[1, k]}^j]}{P_x[A_k^j \mid A_{[1, k]}^j]} \\
&= \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} e^{\lambda_i U_i(x)} + e^{\lambda_{j+1}(\xi_j + (k-1) + \xi_{j+1} + \xi_{j+2})}}{e^{\lambda_j(\xi_{j-1} + \xi_j + (k-1) + \xi_{j+1})}} \\
&= e^{-\lambda_j(k-1)} \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} e^{\lambda_i U_i(x)}}{e^{\lambda_j(\xi_{j-1} + \xi_j + \xi_{j+1})}} + e^{-(\lambda_j - \lambda_{j+1})(k-1)} \frac{e^{\lambda_{j+1}(\xi_j + \xi_{j+1} + \xi_{j+2})}}{e^{\lambda_j(\xi_{j-1} + \xi_j + \xi_{j+1})}} \\
&\leq e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} e^{\lambda_i U_i(x)}}{e^{\lambda_j(\xi_{j-1} + \xi_j + \xi_{j+1})}} + e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{e^{\lambda_{j+1}(\xi_j + \xi_{j+1} + \xi_{j+2})}}{e^{\lambda_j(\xi_{j-1} + \xi_j + \xi_{j+1})}} \\
&= e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} \Gamma_i(x)}{\Gamma_j(x)} + e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{\Gamma_{j+1}(x)}{\Gamma_j(x)}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \left(\frac{\sum_{i \neq \{j-1, j, j+1\}} \Gamma_i(x)}{\Gamma_j(x)} + \frac{\Gamma_{j+1}(x)}{\Gamma_j(x)} \right) \\
&= e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \left(\frac{\sum_{i \neq \{j, j-1\}} \Gamma_i(x)}{\Gamma_j(x)} \right) \\
&\leq e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \left(\frac{1}{P_x[A_{\omega_1}^j]} \right), \text{ como } P_x[A_{\omega_1}^j] > \delta \\
&\leq e^{-(k-1)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{1}{\delta}.
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
\sum_{k=2}^{n_j-1} b_k &= b_2 + b_3 + \dots + b_{n_j-1} \\
&\leq \frac{b_2}{\tilde{P}_2^j} + \frac{b_3}{\tilde{P}_3^j} + \dots + \frac{b_{n_j-1}}{\tilde{P}_{n_j-1}^j} \\
&\leq e^{-(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{1}{\delta} + e^{-2(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{1}{\delta} + \dots + e^{-(n_j-2)(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \frac{1}{\delta} \\
&= \frac{1}{\delta} \left(\sum_{k=1}^{n_j-2} e^{-k(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \right) \\
&\leq \frac{1}{\delta} \left(\sum_{k=0}^{\infty} e^{-k(\lambda_j - \lambda_{j+1})} \right) \\
&= \frac{1}{\delta} \frac{1}{1 - e^{-(\lambda_j - \lambda_{j+1})}} \\
&= \frac{\delta^{-1}}{1 - e^{-(\lambda_j - \lambda_{j+1})}}.
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Portanto,

$$\sum_{k=2}^{n_j-1} (a_k + b_k) < \frac{1}{1 - e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)}} + \frac{\delta^{-1}}{1 - e^{-(\lambda_j - \lambda_{j+1})}}. \tag{5.13}$$

Além disso, $\tilde{P}_k^j + \tilde{P}_k^{j-1}$ é crescente em $k = 1, 2, \dots, n_j$. De fato,

$$\begin{aligned}
\tilde{P}_k^j + \tilde{P}_k^{j-1} &= \tilde{P}_{k-1}^j e^{\lambda_j} + \tilde{P}_{k-1}^{j-1} e^{\lambda_{j-1}} \\
&\geq \tilde{P}_{k-1}^j + \tilde{P}_{k-1}^{j-1},
\end{aligned} \tag{5.14}$$

logo se $\tilde{P}_k^j + \tilde{P}_k^{j-1} \geq \tilde{P}_{k-1}^j + \tilde{P}_{k-1}^{j-1} \geq \dots \geq \delta$ para $k = 2, \dots, n_j$. como $\tilde{P}_k^j + \tilde{P}_k^{j-1} \geq \delta$ e $\tilde{P}_k^j > \tilde{P}_k^{j-1}$, para $k < n_j$, então $\tilde{P}_k^j \geq \frac{\delta}{2}$ e assim

$$a_k + b_k = 1 - \tilde{P}_k^j \leq 1 - \frac{\delta}{2}.$$

Combinando essa última desigualdade com o limitante superior da soma $\sum_{k=2}^{n_j-1} (a_k + b_k)$ obtém-se $\varepsilon(\delta, \Lambda)$ tal que

$$P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j}]}^j] \geq \varepsilon(\delta, \Lambda) \quad (5.15)$$

De fato, como $a_k + b_k \leq 1 - \frac{\delta}{2}$ usando desigualdade da função logarítmica, existe $C \in (0, \infty)$ tal que $\ln(1 - (a_k + b_k)) \geq -C(a_k + b_k)$, assim

$$\begin{aligned} P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j}]}^j] &= P_x[A_{\omega_1}^j] \prod_{k=2}^{n_j-1} (1 - (a_k + b_k)) \\ &= \delta \prod_{k=2}^{n_j-1} e^{\ln(1 - (a_k + b_k))} \\ &\geq \delta e^{\sum_{k=2}^{n_j-1} \ln(1 - (a_k + b_k))} \\ &\geq \delta e^{-C \left(\frac{1}{1 - e^{-(\lambda_{j-1} - \lambda_j)}} + \frac{\delta^{-1}}{1 - e^{-(\lambda_j - \lambda_{j+1})}} \right)} \\ &=: \varepsilon_j > 0 \end{aligned} \quad (5.16)$$

(ii) Seja $\tilde{P}_{n_j}^{j-1} := P_x[A_{\omega_{n_j}}^{j-1} \mid A_{[\omega_1, \omega_{n_j}]}^j]$, como $\tilde{P}_{n_j}^{j-1} + \tilde{P}_{n_j}^j \geq \delta$ e $\tilde{P}_{n_j}^{j-1} \geq \tilde{P}_{n_j}^j$, ou seja, por definição de n_j então,

$$\tilde{P}_{n_j}^{j-1} \geq \frac{\delta}{2} \quad (5.17)$$

□

5.2 Demonstrações dos Lemas 3.0.3, 3.0.4 e 3.0.5

Lema 3.0.3. Seja $\tilde{P}_k^i := P_x[A_{\omega_{k+1}}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^m]$, para $k = 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^m] &= P_x[A_{\omega_1}^m \cap A_{\omega_2}^m \cap \dots] \\ &= P_x[A_{\omega_1}^m] \prod_{k=1}^{\infty} P_x[A_{\omega_{k+1}}^m \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^m] \\ &= P_x[A_{\omega_1}^m] \prod_{k=1}^{\infty} \tilde{P}_k^m \\ &= P_x[A_{\omega_1}^m] \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \sum_{i \neq m} \tilde{P}_k^i \right), \end{aligned} \quad (5.18)$$

se $\widetilde{\Delta}_k := \sum_{i \neq m} \widetilde{P}_k^i$ então de maneira análoga a demonstração do Lema 3.0.1 podemos limitar superiormente $\widetilde{\Delta}_k$.

$$\begin{aligned}
\frac{\widetilde{\Delta}_k}{\widetilde{P}_k^m} &= \frac{\sum_{i \neq m} \widetilde{P}_k^i}{\widetilde{P}_k^m} \\
&= \frac{\sum_{i \neq m} P_x[A_{\omega_{k+1}}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^m]}{P_x[A_{\omega_{k+1}}^m \mid A_{[\omega_1, \omega_k]}^m]} \\
&= \frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus u(m)} e^{\lambda_i U_i(x)} + e^{\lambda_{m-1}(\xi_{m-2} + \xi_{m-1} + \xi_m + k)} + e^{\lambda_{m+1}(\xi_m + k + \xi_{m+1} + \xi_{m+2})}}{e^{\lambda_m(\xi_{m-1} + \xi_m + k + \xi_{m+1})}} \\
&= e^{-\lambda_m k} \left(\frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus u(m)} e^{\lambda_i U_i(x)}}{e^{\lambda_m U_m(x)}} \right) + e^{-k(\lambda_m - \lambda_{m-1})} \left(\frac{e^{\lambda_{m-1} U_{m-1}(x)}}{e^{\lambda_m U_m(x)}} \right) + e^{-k(\lambda_m - \lambda_{m+1})} \left(\frac{e^{\lambda_{m+1} U_{m+1}(x)}}{e^{\lambda_m U_m(x)}} \right) \\
&= e^{-\lambda_m k} \left(\frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus u(m)} \Gamma_i(x)}{\Gamma_m(x)} \right) + e^{-k(\lambda_m - \lambda_{m-1})} \left(\frac{\Gamma_{m-1}(x)}{\Gamma_m(x)} \right) + e^{-k(\lambda_m - \lambda_{m+1})} \left(\frac{\Gamma_{m+1}(x)}{\Gamma_m(x)} \right) \\
&\leq e^{-k(\lambda_m - \lambda)} \left(\frac{\sum_{i \in \mathbb{N} \setminus u(m)} \Gamma_i(x) + \Gamma_{m-1}(x) + \Gamma_{m+1}(x)}{\Gamma_m(x)} \right), \text{ em que } \lambda := \max\{\lambda_{m-1}, \lambda_{m+1}\} \\
&= e^{-k(\lambda_m - \lambda)} \left(\frac{\sum_{i \neq m} \Gamma_i(x)}{\Gamma_m(x)} \right) \\
&\leq e^{-k(\lambda_m - \lambda)} \left(\frac{1 - \delta}{\delta} \right). \tag{5.19}
\end{aligned}$$

Combinando a última desigualdade com o fato de que $\widetilde{P}_k^m + \widetilde{\Delta}_k = 1$

$$\begin{aligned}
\frac{\widetilde{\Delta}_k}{\widetilde{P}_k^1} &\leq e^{-k(\lambda_m - \lambda)} \left(\frac{1 - \delta}{\delta} \right) \Leftrightarrow \frac{1 - \widetilde{\Delta}_k}{\widetilde{\Delta}_k} \geq \frac{\delta e^{k(\lambda_m - \lambda)}}{1 - \delta} \\
&\Leftrightarrow \frac{1}{\widetilde{\Delta}_k} \geq \frac{\delta e^{k(\lambda_m - \lambda)} + (1 - \delta)}{1 - \delta} \\
&\Leftrightarrow \widetilde{\Delta}_k \leq \frac{1 - \delta}{\delta e^{k(\lambda_m - \lambda)} + 1 - \delta} := a_k(\delta, \Lambda). \tag{5.20}
\end{aligned}$$

Assim,

$$P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^1] = P_x[A_{\omega_1}^1] \prod_{k=1}^{\infty} \left(1 - \sum_{i \neq 1} \widetilde{\Delta}_k \right) \geq \delta e^{\sum_{k=1}^{\infty} \ln(1 - a_k)}. \tag{5.21}$$

Além disso, $0 < a_k(\delta, \Lambda) \leq 1 - \delta$, assim usando desigualdade da função logarítmica, pode-se encontrar uma constante $C = C(\delta) \in (0, \infty)$ tal que $\ln(1 - a_k) \geq -C a_k$, então analogamente à demonstração do Lema 3.0.1 tem-se que

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{\infty} \ln(1 - a_k) &\geq -C \sum_{i=1}^{\infty} a_k \\
&= -C \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1 - \delta}{1 - \delta + \delta e^{k(\lambda_m - \lambda)}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\geq -C(1-\delta) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\delta e^{k(\lambda_m-\lambda)}} \\
&\geq \frac{-C(1-\delta)}{\delta} \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{1}{e^{(\lambda_m-\lambda)}} \right)^k \\
&\geq -\frac{C(1-\delta)}{\delta} \left(\frac{1}{1-e^{-(\lambda_m-\lambda)}} \right). \tag{5.22}
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
P_x[A_{[\omega_1, \infty)}^m] &\geq \delta e^{\sum_{k=1}^{\infty} \ln(1-a_k)} \\
&\geq \delta \exp \left\{ -\frac{C(1-\delta)}{\delta(1-e^{-(\lambda_m-\lambda)})} \right\} =: \varepsilon_m(\delta, \Lambda) > 0 \tag{5.23}
\end{aligned}$$

□

Lema 3.0.4. A demonstração é a mesma do Lema 3.0.2 item i, já que podemos considerar sem perda de generalidade $\lambda_{j-1} > \lambda_j$. Então

$$P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \delta \exp \left\{ -C \left(\frac{1}{1-e^{-(\lambda_{j-1}-\lambda_j)}} + \frac{1}{e^{-(\lambda_j-\lambda_{j+1})}} \right) \right\} =: \varepsilon_j > 0. \tag{5.24}$$

Se considerarmos $\lambda_j < \lambda_{j+1}$ então de forma análoga a demonstração do 3.0.2 obtemos que

$$P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \delta \exp \left\{ -C \left(\frac{1}{1-e^{-(\lambda_{j+1}-\lambda_j)}} + \frac{1}{e^{-(\lambda_j-\lambda_{j-1})}} \right) \right\} =: \varepsilon_j > 0. \tag{5.25}$$

□

Lema 3.0.5. Seja $\tilde{P}_k^i = P_x[A_{\omega_k}^i \mid A_{[\omega_1, \omega_k)}^j]$ seja $n_j = n_j(\Lambda, \delta)$ o menor número tal que

$$\max_{i=j+1, j-1} \tilde{P}_{n_j}^i \geq \tilde{P}_{n_j}^j$$

De maneira análoga ao Lema 3.0.2 pode-se mostrar que existe $\varepsilon_j(\delta, \Lambda)$ tal que

$$P_x[A_{[\omega_1, \omega_{n_j})}^j] \geq \varepsilon$$

Seja $j^* \in \{j-1, j+1\}$ o índice que primeiro ultrapassa a probabilidade em j . Então o lema pode ser aplicado para j^* . □

6 Simulação do Processo de Crescimento

Neste capítulo serão apresentados as simulações e resultados obtidos e o método utilizado para gerar o sítio aleatório em que a partícula foi adsorvida.

6.1 Simulação

Para verificar o processo de adsorção das partículas foram realizadas simulações, considerando um número finito de sítios e diferentes fórmulas para os parâmetros λ_i . A simulação do processo consistiu em atribuir valores pré-fixados para λ e considerando uma configuração inicial $X(0)$. Os cálculos foram realizados utilizando-se Sistema Computacional Estatístico R ([R Core Team, 2017](#)).

Para os valores de lambdas foram consideradas funções crescentes, decrescentes, funções que possuem máximos local e funções constantes. Além disso, foram consideradas diferentes configurações iniciais. A cada iteração feita um novo sítio é escolhido para receber uma nova partícula com probabilidade definida anteriormente em (2.3). Para a escolha do sítio foi utilizado o método da transformada inversa.

6.1.1 Método da transformada inversa

O método da transformada inversa consiste na simulação de variáveis aleatórias de outros modelos probabilísticos, através da simulação inicial com variáveis aleatórias uniformemente distribuídas em $[0, 1]$.

Para gerar variáveis aleatórias a partir de distribuições discretas, [Ross \(2010\)](#), apresenta um método análogo da transformada inversa.

Seja,

$$p[X = x_i] = P_i, \quad i = 1, 2, \dots, \quad (6.1)$$

em que $\sum_i P_i = 1$.

Para simular X para o qual $P[X = x_i] = P_i$, supondo U uniformemente

distribuído ao longo de $[0, 1]$ façamos

$$X = \begin{cases} x_1, & \text{se } U \leq P_1 \\ x_2, & \text{se } P_1 < U \leq P_1 + P_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_j & \text{se } \sum_{j=1}^{i-1} P_j < U \leq \sum_{j=1}^i P_j \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{cases} \quad (6.2)$$

Como

$$P[X = x_i] = P \left[\sum_{j=1}^{i-1} P_j < U \leq \sum_{j=1}^i P_j \right] = P_i, \quad (6.3)$$

tem-se que X tem a distribuição desejada.

Os resultados dessa simulação permitem a análise do comportamento assintótico do processo de adsorção. Se considerar, por exemplo, $\lambda_i = i$, em que i representa o i -ésimo sítio e se a configuração inicial conta com apenas uma partícula no sítio 1, então a primeira partícula pode ser adsorvida apenas pelos sítios 1 ou 2, que são os únicos com vizinhança diferente de 0. A probabilidade da partícula ser adsorvida nos sítios 1 e 2 são dadas respectivamente por

$$P[\text{cair em 1}] = \frac{e^1}{e^1 + e^2}, \quad (6.4)$$

$$P[\text{cair em 2}] = \frac{e^1}{e^1 + e^2}. \quad (6.5)$$

A probabilidade da partícula ser adsorvida nos demais sítios é

$$P[\text{cair em algum outro sítio}] = 0. \quad (6.6)$$

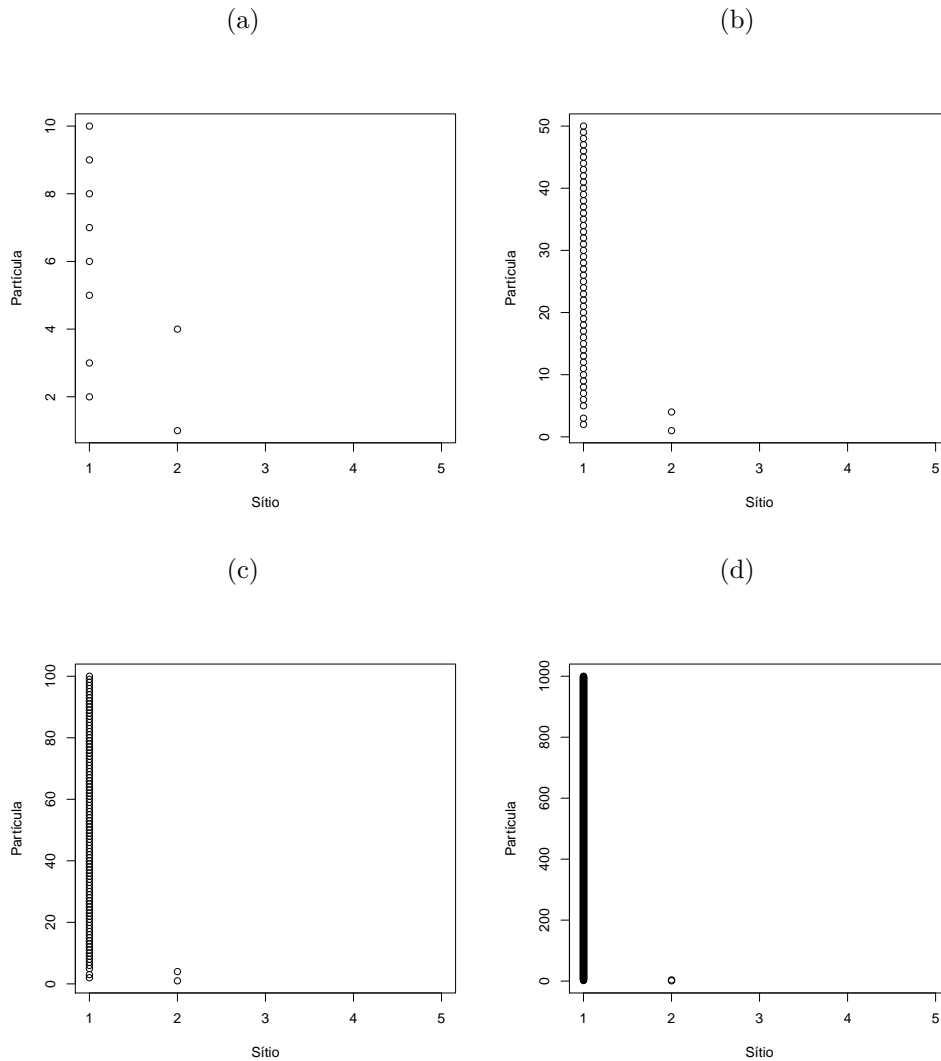
6.2 Resultados das simulações

Nessa seção serão apresentados os resultados obtidos considerando diferentes fórmulas para lambdas e diferentes configurações iniciais x .

6.2.1 Lambdas decrescentes

Na Figura 3 é apresentado o sítio onde cada partícula foi adsorvida, em que cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/i$. A configuração inicial considerada foi $x = (1, 0, \dots)$. Para uma melhor visualização, as Figuras mostram o processo de adsorção das primeiras 10, 50, 100 e 1000 partículas, respectivamente.

Figura 3 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



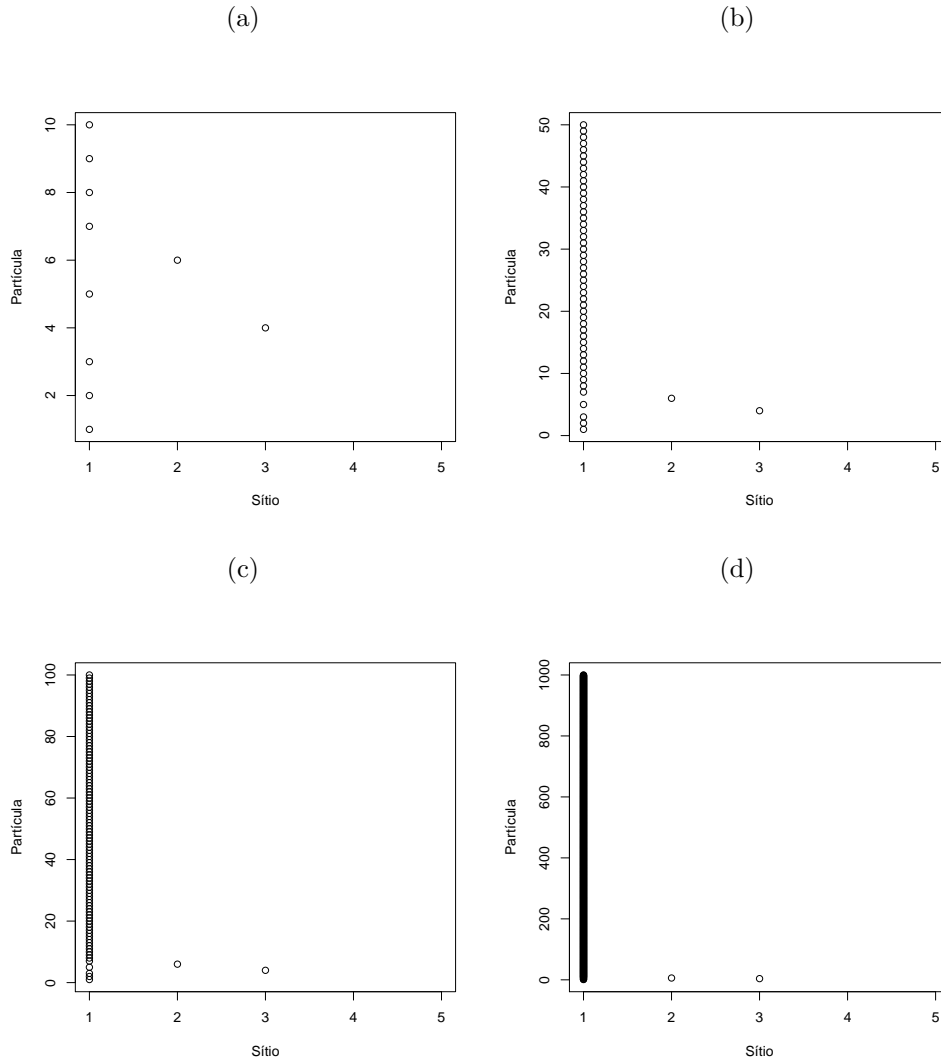
Fonte: os autores

É possível observar na Figura 3, que a adsorção da primeira partícula ocorreu no sítio 2, a segunda e terceira foi no sítio 1, já a quarta partícula foi adsorvida pelo sítio 2 novamente e o sítio 1 adsorve todas as próximas partículas, o que está de acordo com o Teorema 2.2.2.

Na Figura 4 é apresentado o sítio em que cada partícula foi adsorvida consi-

derando $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ como configuração inicial. As Figuras 4(a), 4(b), 4(c) e 4(d) mostram o processo de adsorção das primeiras 10, 50, 100 e 1000 partículas, respectivamente.

Figura 4 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

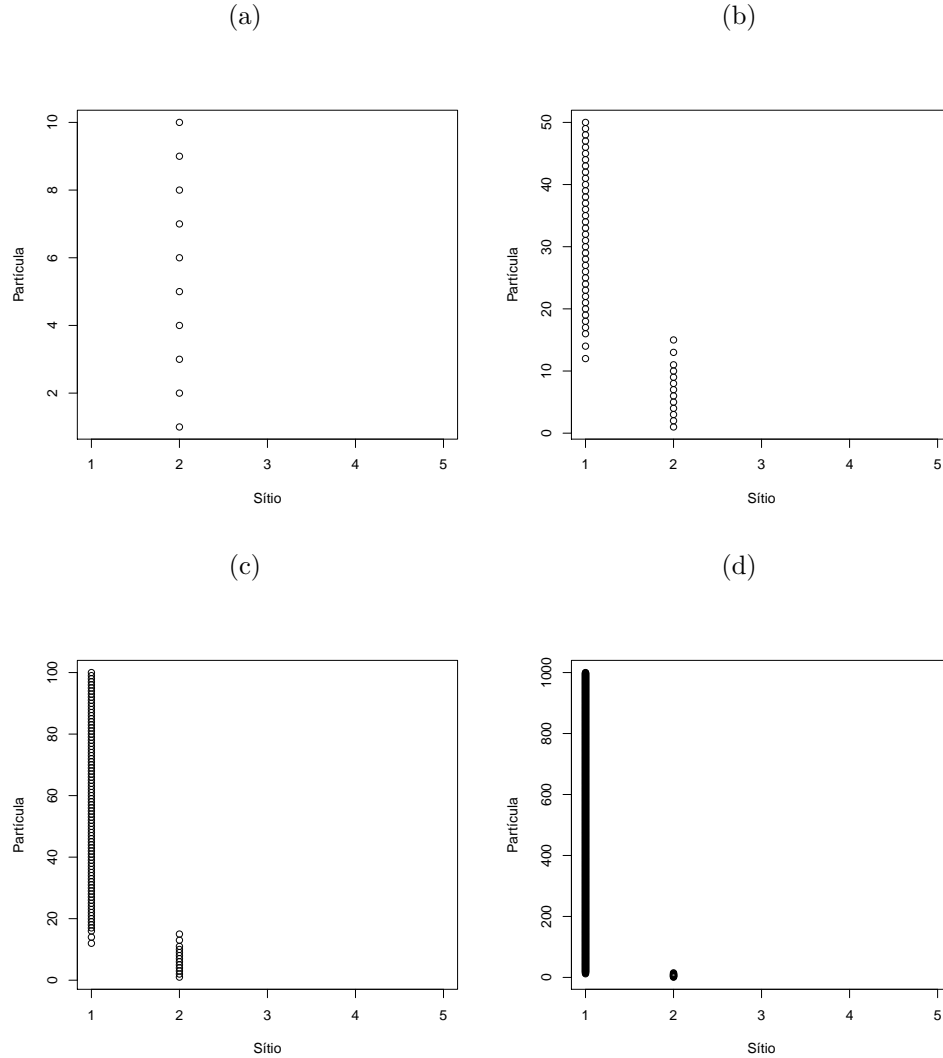


Fonte: os autores

As primeiras partículas foram adsorvidas pelos sítios 1, 2 e 3 e todas as próximas partículas são adsorvidas pelo o sítio 1 como pode ser visto na Figura 4.

Na figura 5 está apresentado o sítio em que as primeiras partículas foram adsorvidas, após a configuração inicial que apresenta partículas nos primeiros 8 sítios e cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/i$ e a vizinhança de cada sítio.

Figura 5 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 8 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

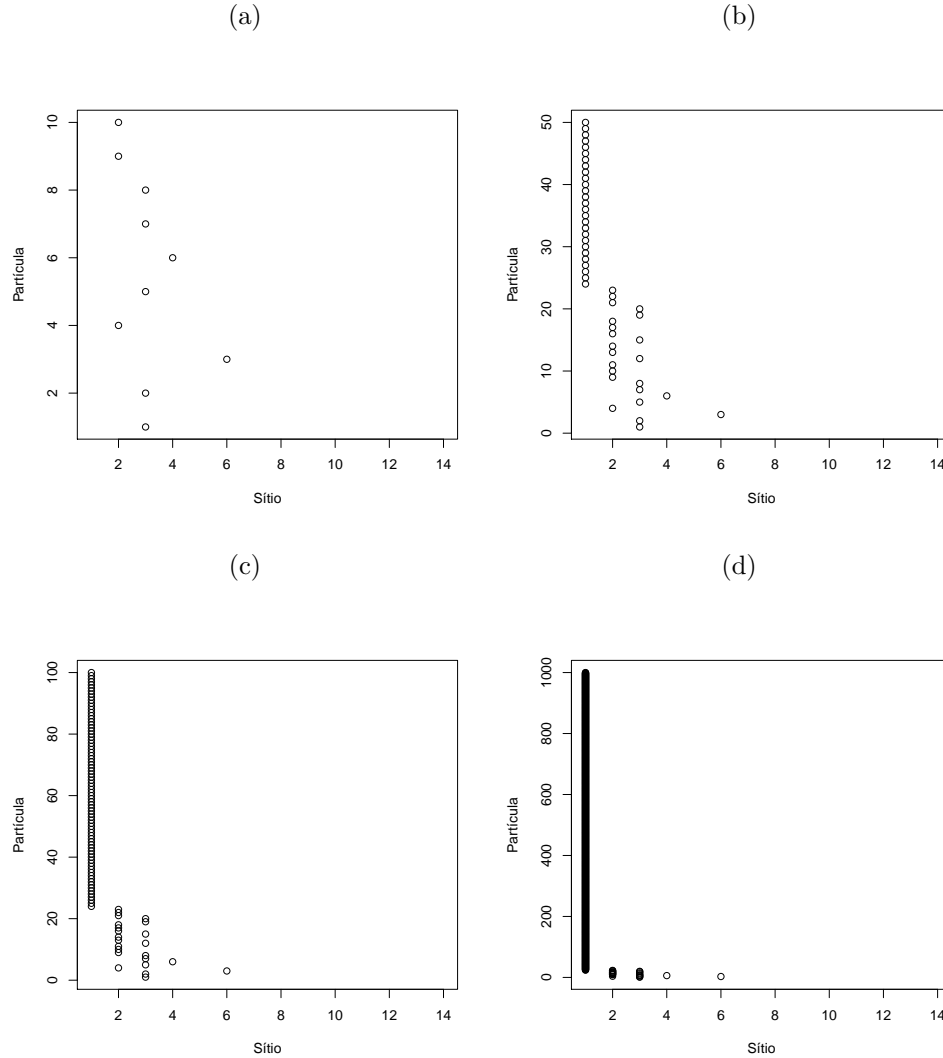


Fonte: os autores

Na Figura 5, é possível ver que o sítio 2 adsorve todas as partículas no início e a partir de um tempo as partículas são adsorvidas pelo sítio 1. A diferença de comportamento do processo de adsorção analisado pela configuração inicial com 8 sítios com partículas em relação as outras duas configurações iniciais com um e três sítios com partículas é que nesse caso mais partículas são adsorvidas fora do sítio 1.

Na Figura 6 está apresentado o sítio em que as primeiras partículas foram adsorvidas após a configuração inicial, que apresenta partículas apenas nos 12 primeiros sítios, que cada sítio i possui também probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/i$ e a vizinhança de cada sítio.

Figura 6 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

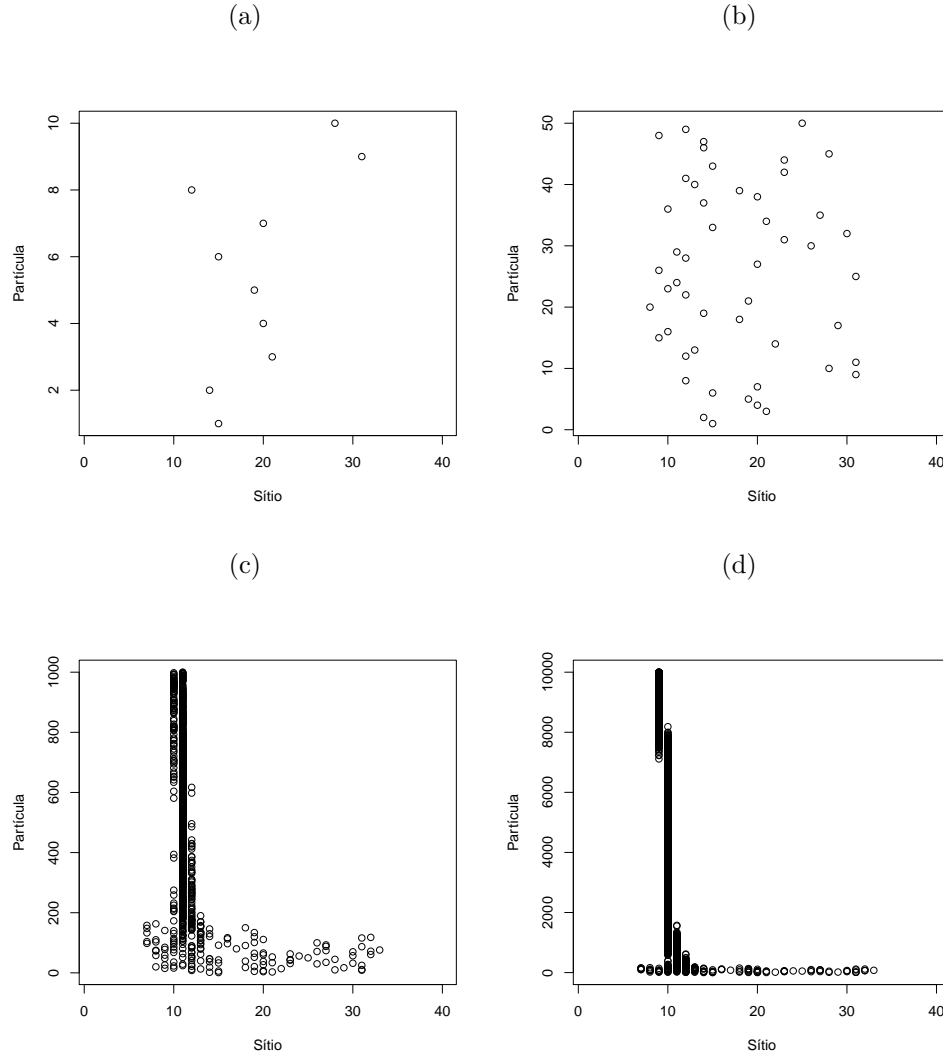


Fonte: os autores

De forma análoga ao comportamento observado pelas diferentes configurações iniciais apresentados nas Figuras 3, 4 e 5 verifica-se na Figura 6 que a partir de um tempo as partículas são adsorvidas pelo sítio 1.

A Figura 7 apresenta o sítio em que as primeiras partículas foram adsorvidas após a configuração inicial em que existem partículas apenas nos sítios de 10 à 30, e que cada sítio i possui também probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/i$ e a vizinhança de cada sítio. Para uma melhor visualização, as Figuras mostram, respectivamente, o processo de adsorção das primeiras 10, 50, 1000 e 10000 partículas.

Figura 7 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=1000$ e (d) $n=10000$.

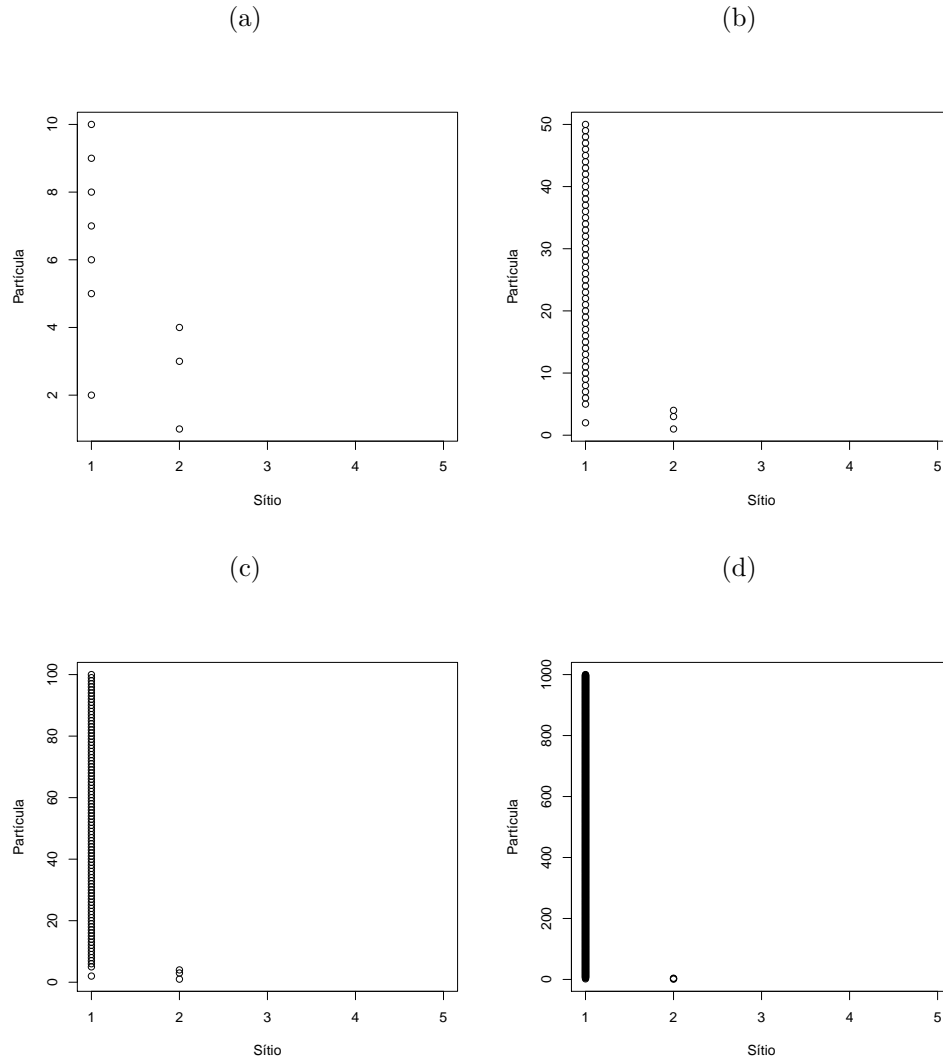


Fonte: os autores

É possível verificar na Figura 7 que as primeiras partículas são adsorvidas de forma aleatória nos sítios em que as vizinhanças são diferentes de zero, mas que a partir de um número de partículas adsorvido as próximas partículas são adsorvidas por sítios cada vez mais próximos do sítio 1 até que o sítio 1 tenha probabilidade positiva de adsorver e então adsorver todas as próximas partículas.

Na Figura 8 apresenta-se o sítio em que cada partícula foi adsorvida, considerando que cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/\log(i + 1)$ e considerando também a configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$.

Figura 8 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/\log(i + 1)$, configuração inicial $(1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

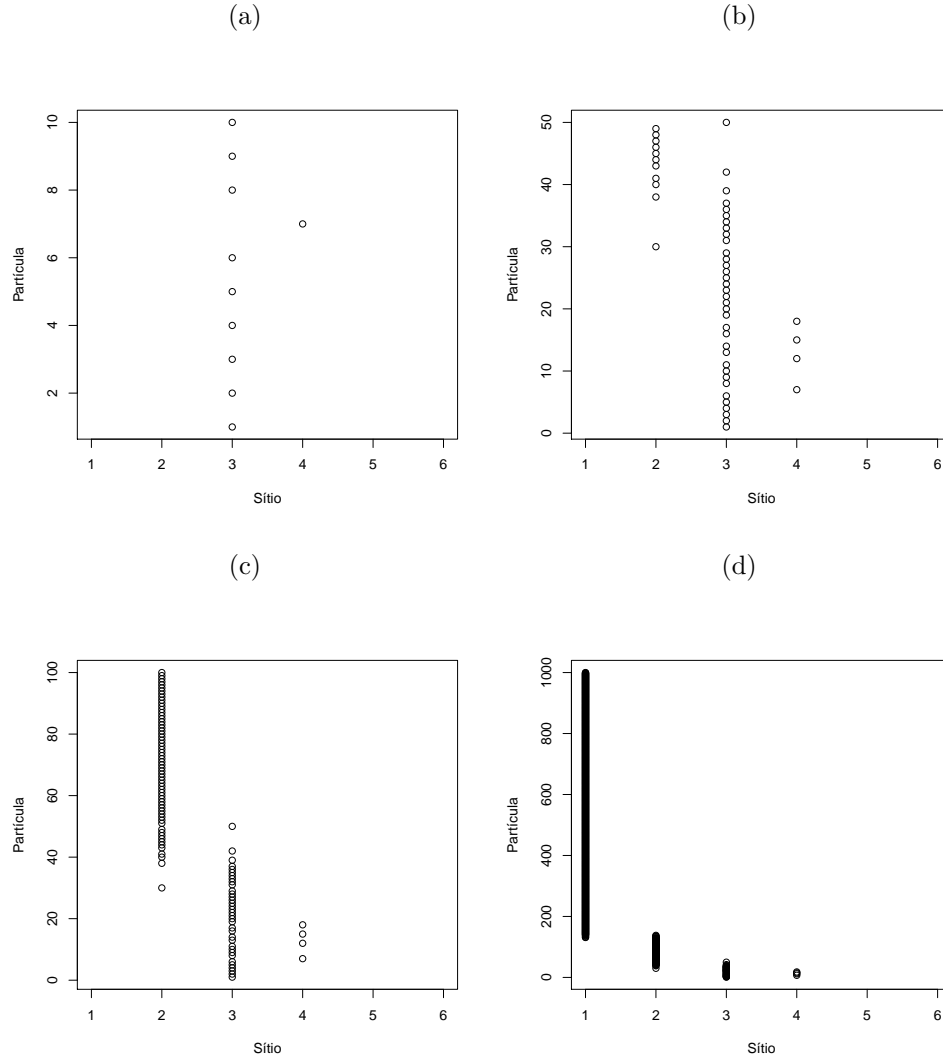


Fonte: os autores

Verifica-se na Figura 8 que as primeiras partículas são adsorvidas pelos sítios 1 e 2 e que a partir da quinta partícula somente o sítio 1 adsorve.

A Figura 9 apresenta o sítio em que cada partícula foi adsorvida considerando ainda que cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/\log(i + 1)$ e a configuração inicial com os 12 primeiros sítios contendo uma quantidade aleatória de partículas.

Figura 9 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/\log(i + 1)$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

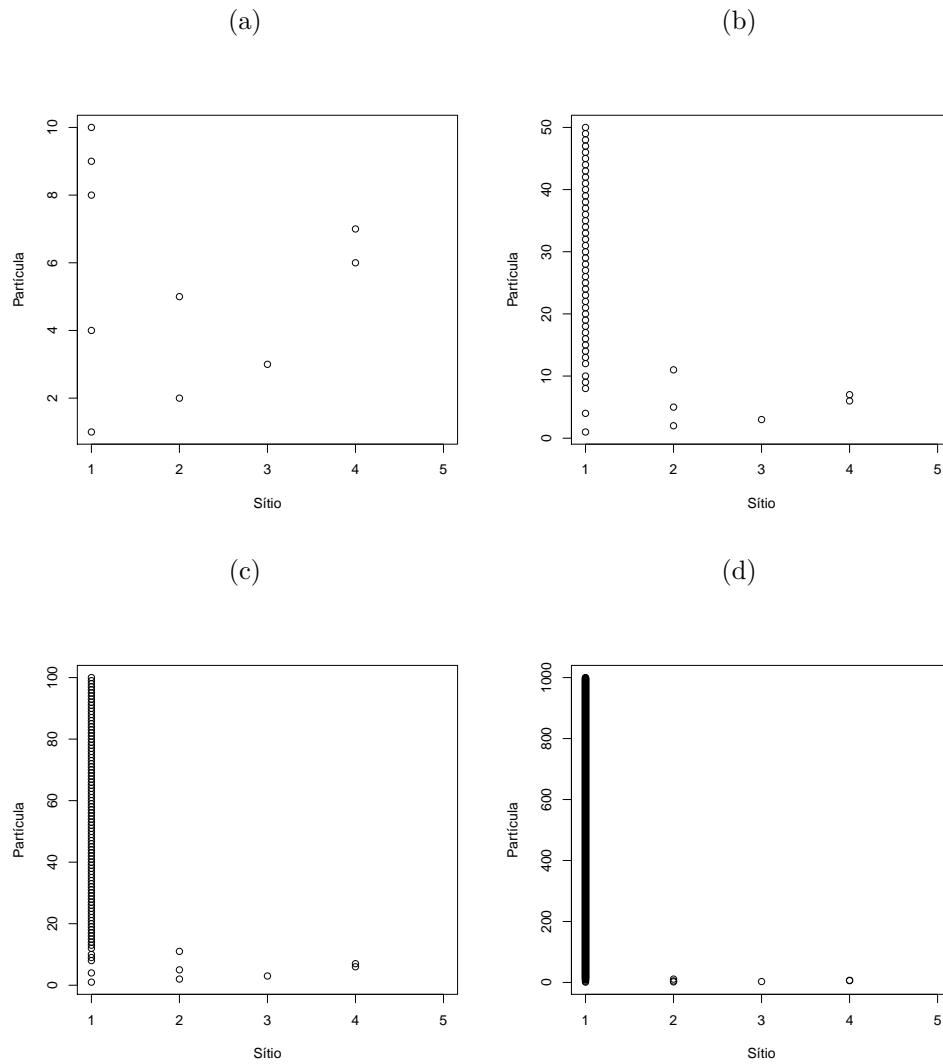


Fonte: os autores

Nota-se que as primeiras partículas são adsorvidas nos sítios 3 e 4 após um tempo as partículas são adsorvidas pelos sítios 2 e 3 depois adsorvidas pelos sítios 1 e 2 e então depois passam a serem adsorvidas apenas pelo sítio 1 (FIGURA 9).

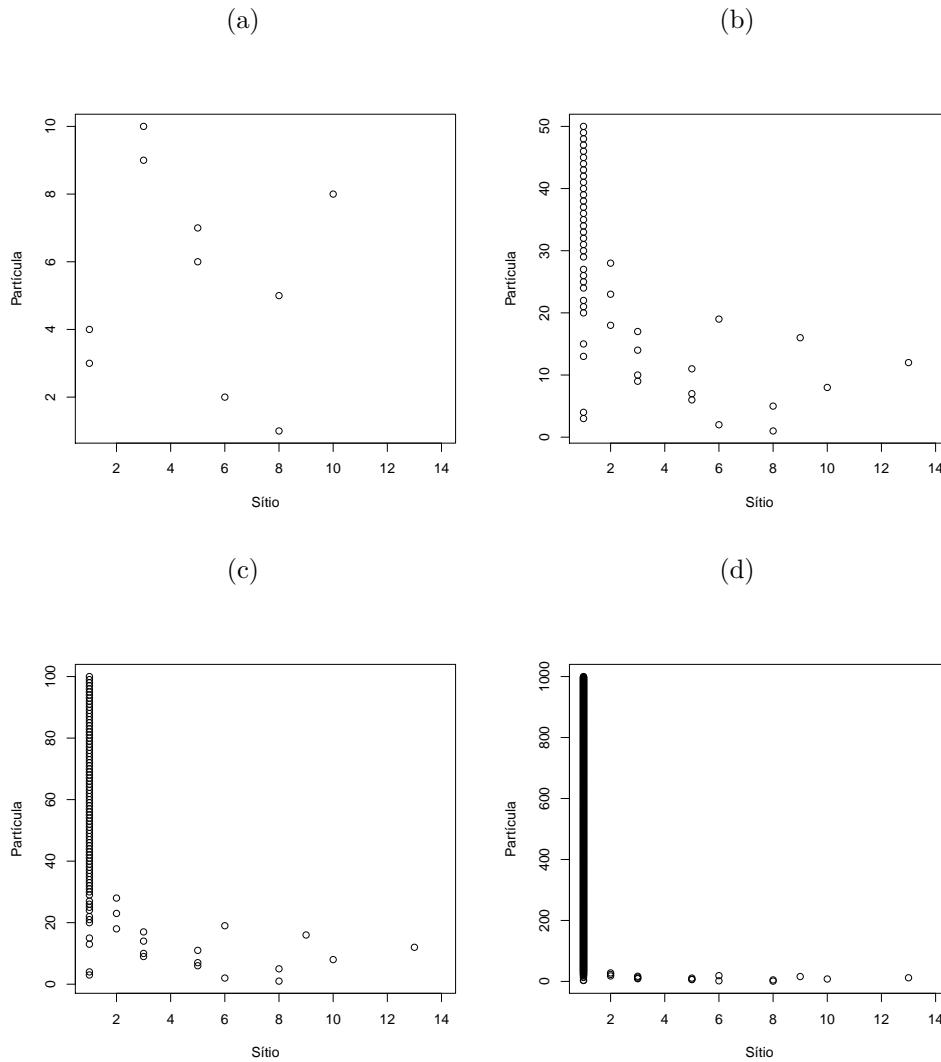
Nas Figuras 10 e 11 são apresentados o sítio em que cada partícula foi adsorvida considerando que cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/e^i$ e a com as respectivas configurações iniciais $x = (1, 0, \dots)$ e $x' = (\xi_1, \xi_2, \dots)$ tal que $\xi_i = 0$ para todo $i > 12$, ou seja, os primeiros 12 sítios contendo uma quantidade aleatória de partículas.

Figura 10 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/e^i$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Figura 11 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/e^i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

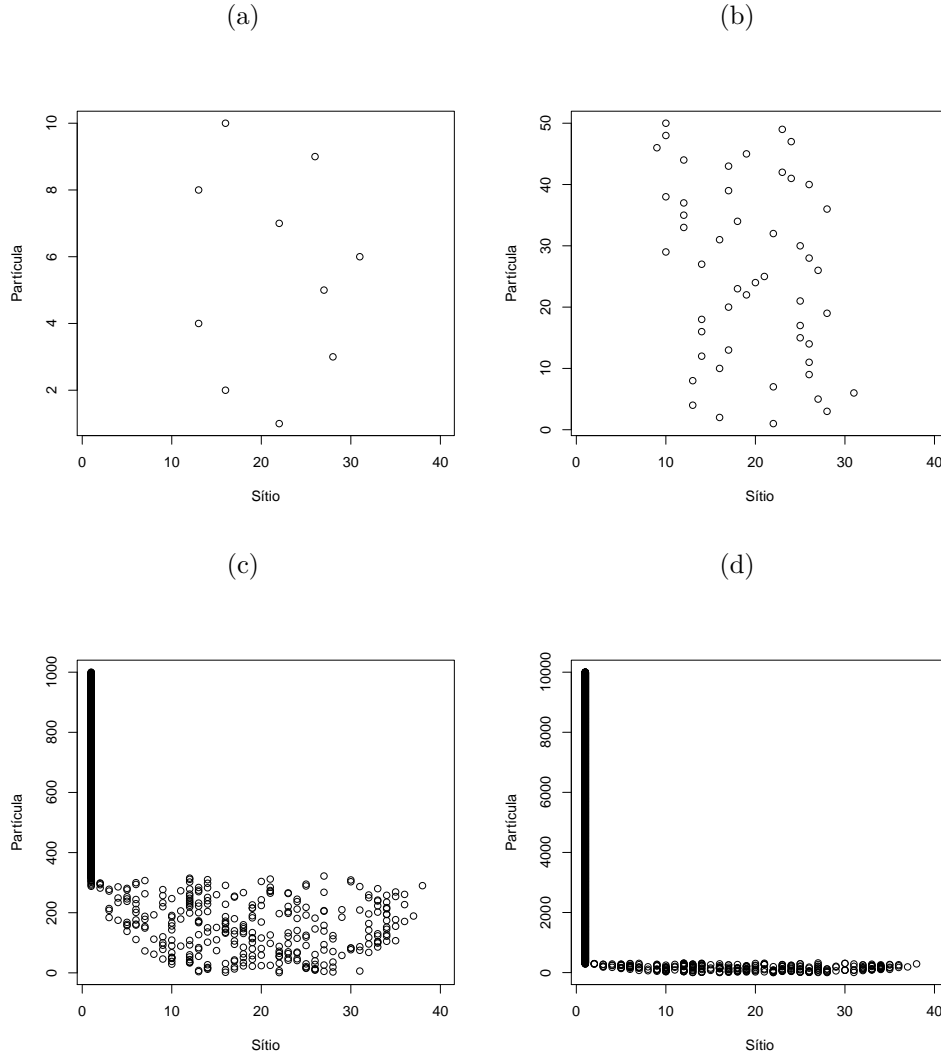


Fonte: os autores

Pode-se observar nas Figuras 10 e 11 que o comportamento dos processos de adsorção foram análogos para as configuração iniciais consideradas, apresentando adsorção das primeiras partículas em diferentes sítios e a partir de um tempo passam a serem adsorvidas pelo sítio 1.

A Figura 12 apresenta o sítio em que cada partícula foi adsorvida considerando ainda que cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = 1/e^i$ e a configuração inicial com partículas do sítio 10 ao sítio 30.

Figura 12 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1/e^i$, configuração inicial com partículas nos sítios de 10 à 30 e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=1000$ e (d) $n=10000$.



Fonte: os autores

É possível verificar na Figura 12 que mesmo a configuração inicial não tendo partículas no sítio 1 há um comportamento análogo aos demais casos em que $\lambda_i = 1/e^i$, ou seja, depois de adsorvidas algumas partículas as próximas são adsorvidas apenas pelo sítio 1.

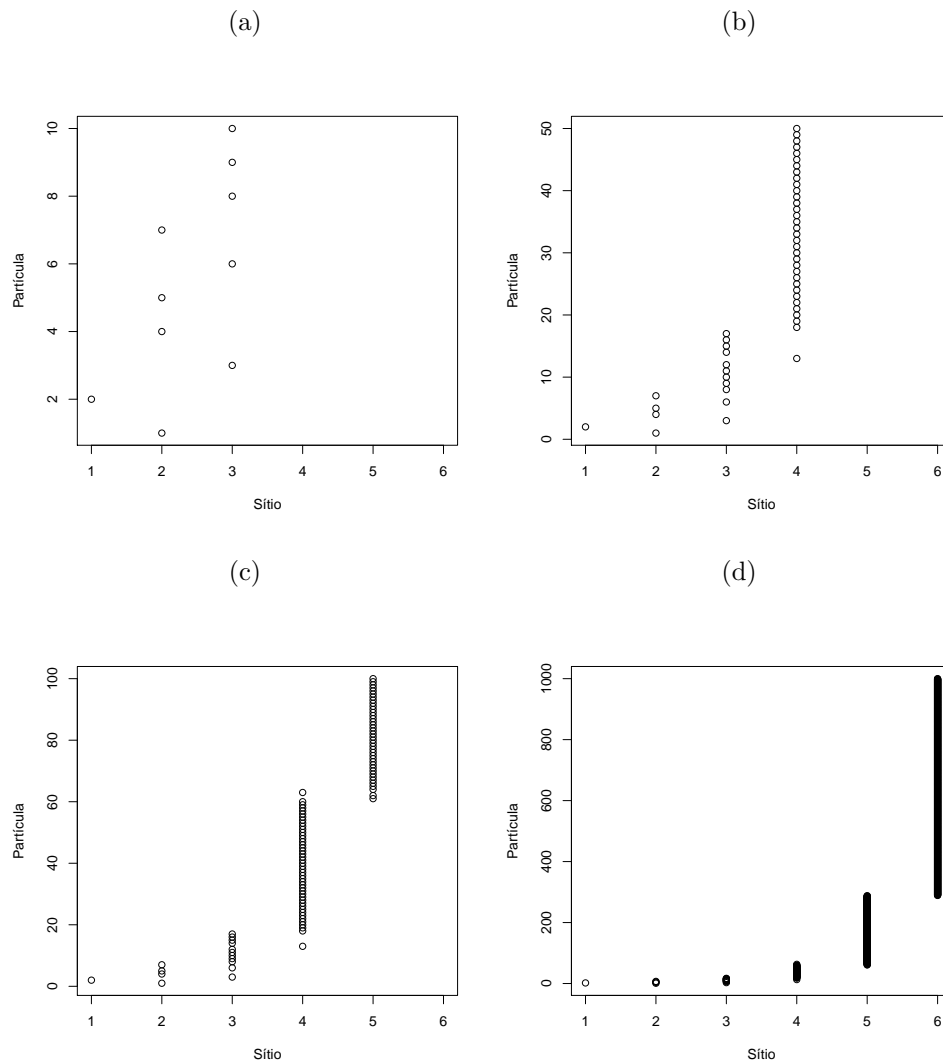
Analisando de uma forma geral o comportamento do processo de adsorção considerando λ decrescente, $\lambda_i = \frac{1}{i}$, $\lambda_i = \frac{1}{\log(1+i)}$ e $\lambda_i = \frac{1}{e^i}$, e diferentes configurações iniciais, pode-se observar que a partir de um momento as partículas passam a ser adsorvidas somente pelo sítio 1, como foi visto no Teorema 2.2.2.

6.2.2 Lambdas crescentes

Nessa seção estão os resultados das simulações considerando λ crescentes, assim como na última seção serão considerados diferentes funções $i \rightarrow \lambda_i$ e diferentes configurações iniciais.

A Figura 13 apresenta o sítio em que cada partícula foi adsorvida considerando ainda que cada sítio i possui probabilidade de adsorção relacionada à $\lambda_i = i$ e a configuração inicial com apenas uma partícula no sítio 1.

Figura 13 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



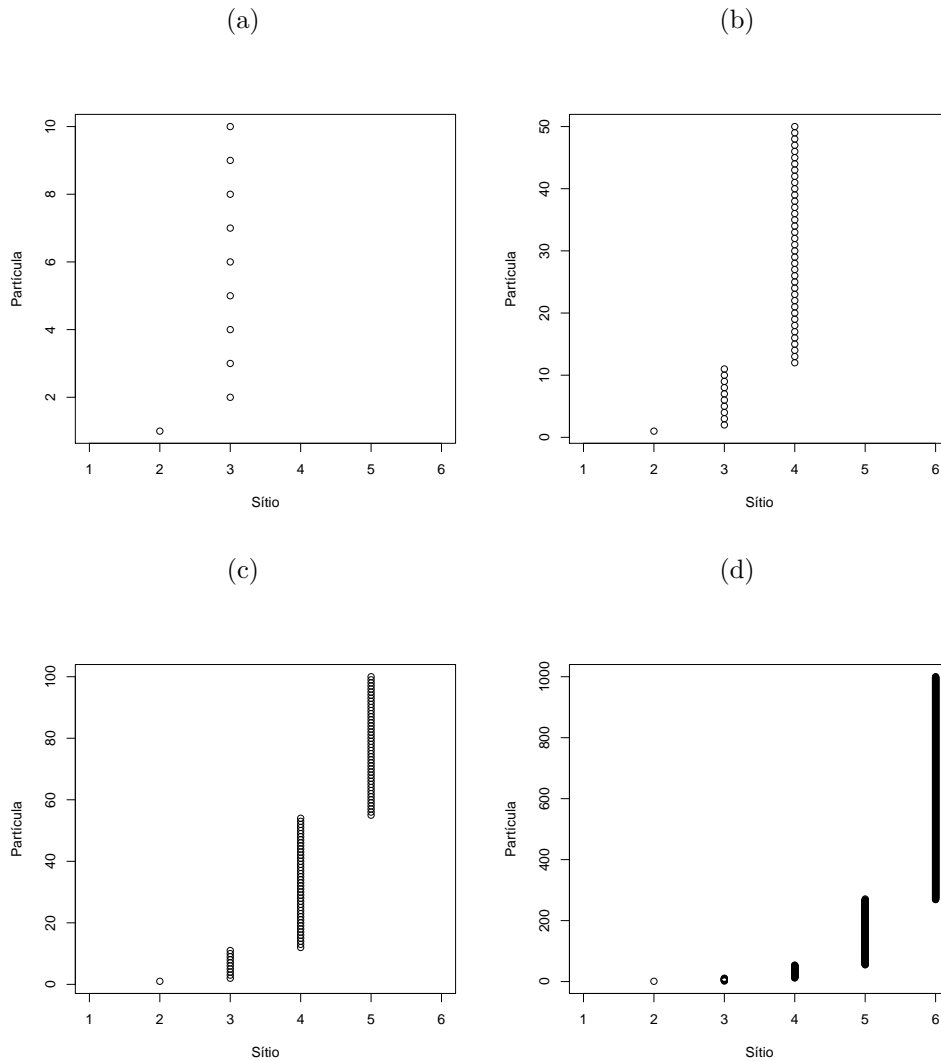
Fonte: os autores

Pode-se observar que a primeira partícula é adsorvida pelo sítio 2 e depois é adsorvida pelo sítio 1, a terceira e quarta são adsorvidas novamente pelo sítio 2 e depois o sítio 3 passa a adsorver as próximas partículas (FIGURA 14(a)). Observa-se na Figura

13, de uma forma geral, que a partícula é adsorvida por um sítio i depois passa a ser adsorvida pelo próximo sítio $i + 1$, voltando algumas vezes para o sítio i até que passa a ser adsorvida apenas pelo sítio $i + 1$ e depois de um tempo oscila entre $i + 1$ e $i + 2$.

Na Figura 14 está representado o sítio em que cada partícula foi adsorvida, considerando uma configuração inicial $x = (1, 2, 1, \dots)$.

Figura 14 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

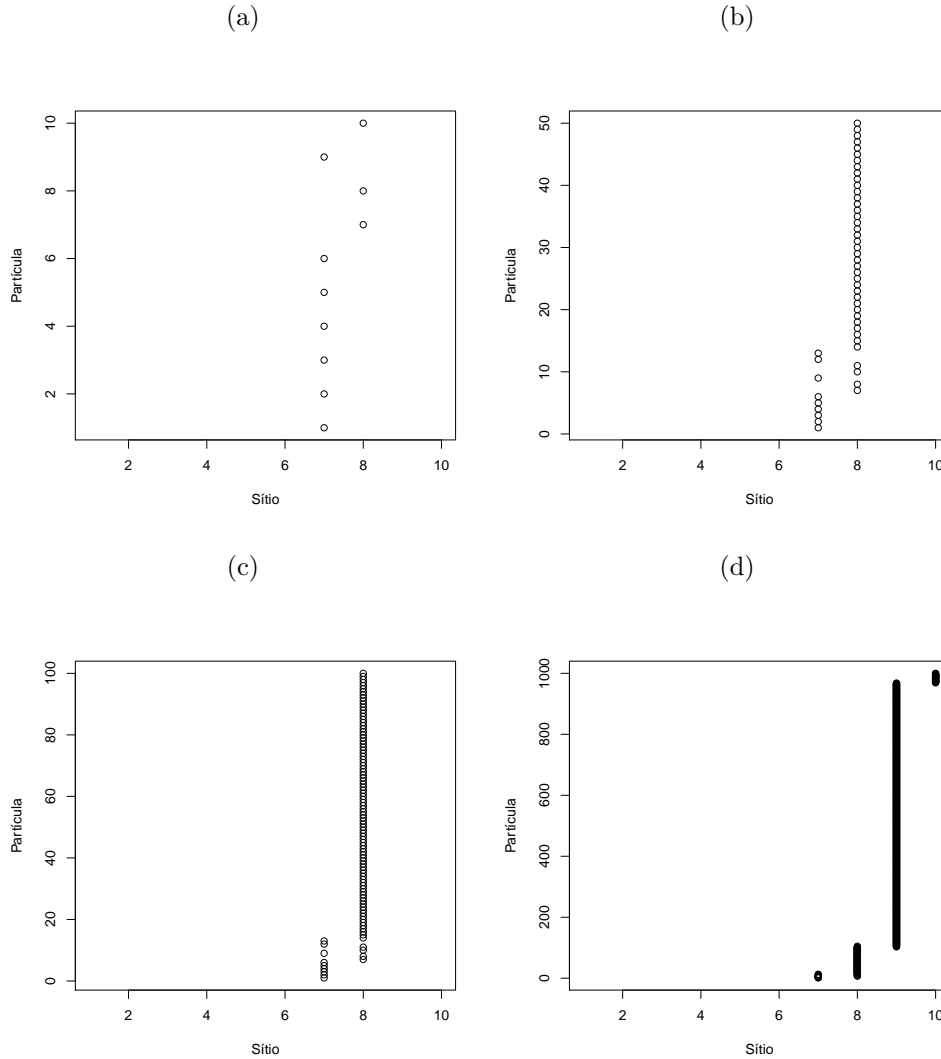


Fonte: os autores

A primeira partícula é adsorvida pelo sítio 2 e as próximas 10 partículas são adsorvidas pelo sítio 3 (FIGURA 15(a)). As partículas nesse caso são adsorvidas em sítio por um tempo e depois passam a ser adsorvidas pelo próximo sítio por um tempo maior como pode ser visto na Figura 14.

A Figura 15 apresenta o sítio em que cada partícula foi adsorvida para $\lambda_i = i$ e configuração inicial com partículas nos 8 primeiros sítios.

Figura 15 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial com partículas nos 8 primeiros sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

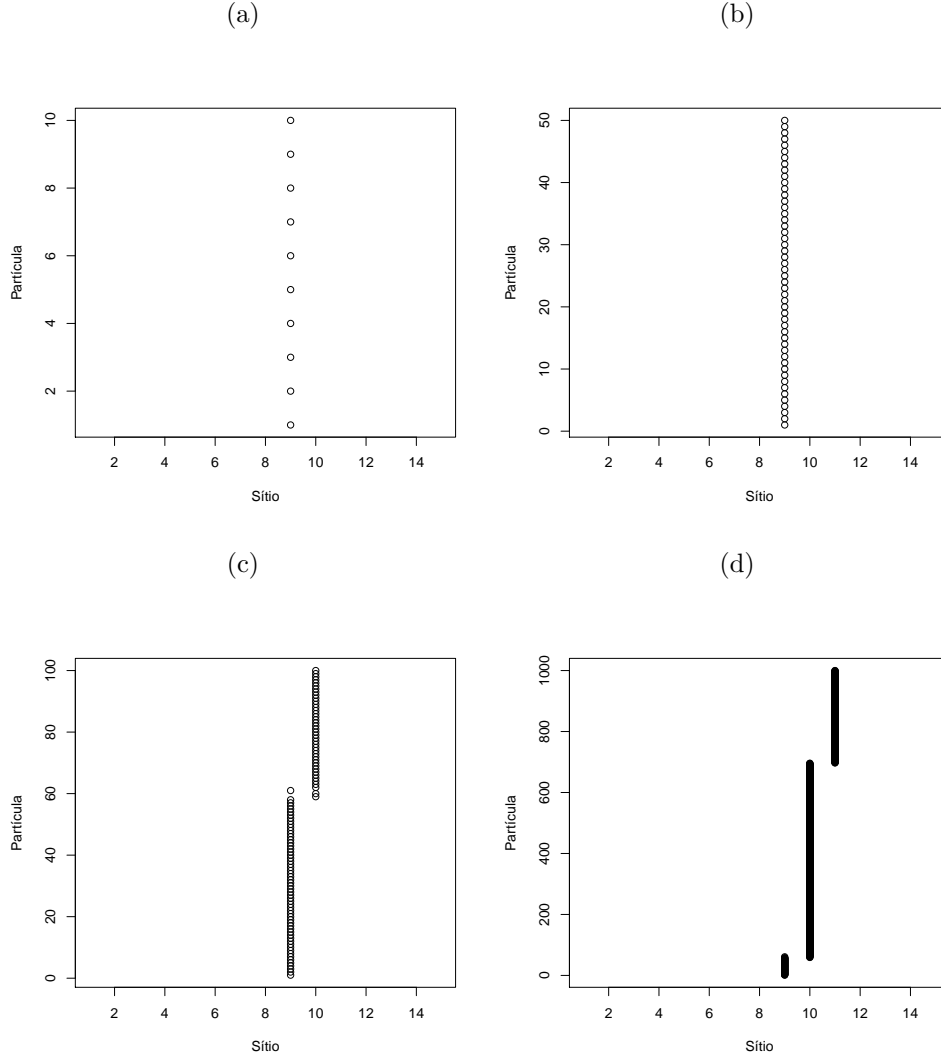


Fonte: os autores

Observa-se que de maneira análoga as últimas figuras apresentadas as partículas são adsorvidas por sítios subsequentes, na Figura 15, é possível ver que a primeira partícula é adsorvida pelo sítio 7.

A Figura 16 mostra o sítio em que cada partícula é adsorvida, considerando uma configuração inicial com um número aleatório de partículas nos primeiros 20 sítios.

Figura 16 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = i$, configuração inicial com partículas nos primeiros 12 sítios e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

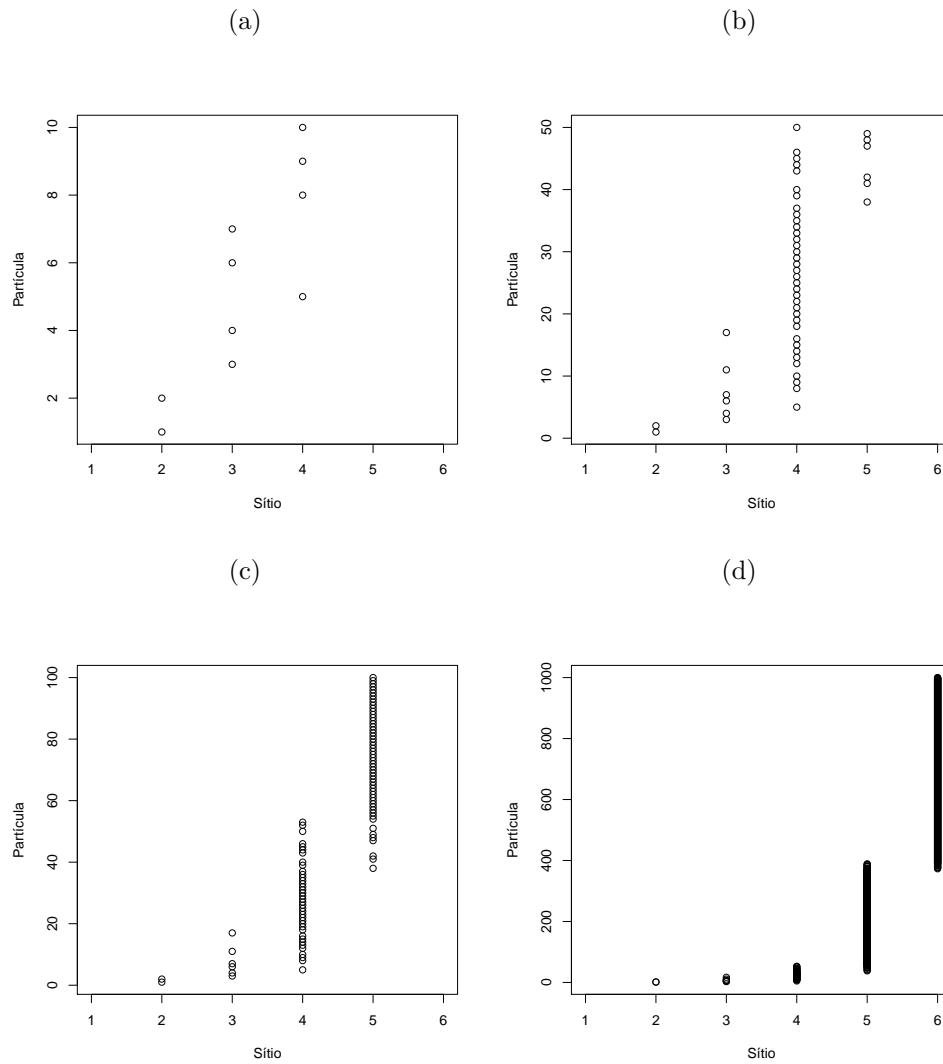


Fonte: os autores

É possível ver na Figura 16 que o processo de adsorção ocorre de forma semelhante ao que ocorreu nas demais configurações, o sítio 9 adsorve as primeiras partículas que passam a ser adsorvidas depois por sítios subsequentes, e nota-se que as primeiras 1000 partículas são adsorvidas apenas pelos sítios 9, 10 e 11. Portanto as partículas são adsorvidas pelo sítio subsequente depois que o sítio adsorve um número partículas e esse número aumenta à cada próximo sítio.

As Figuras 17,18,19,20 apresentam o sítio em que as primeiras partículas são adsorvidas considerando $\lambda = \log(n)$ com as respectivas configurações iniciais $x = (1, 0, \dots)$, $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$, $x = (6, 7, 9, 4, 6, 24, 22, 13, 0, 0, \dots)$ e $x = (34, 51, 41, 64, 50, 16, 21, 6, 29, 9, 37, 67, 0, 0, \dots)$.

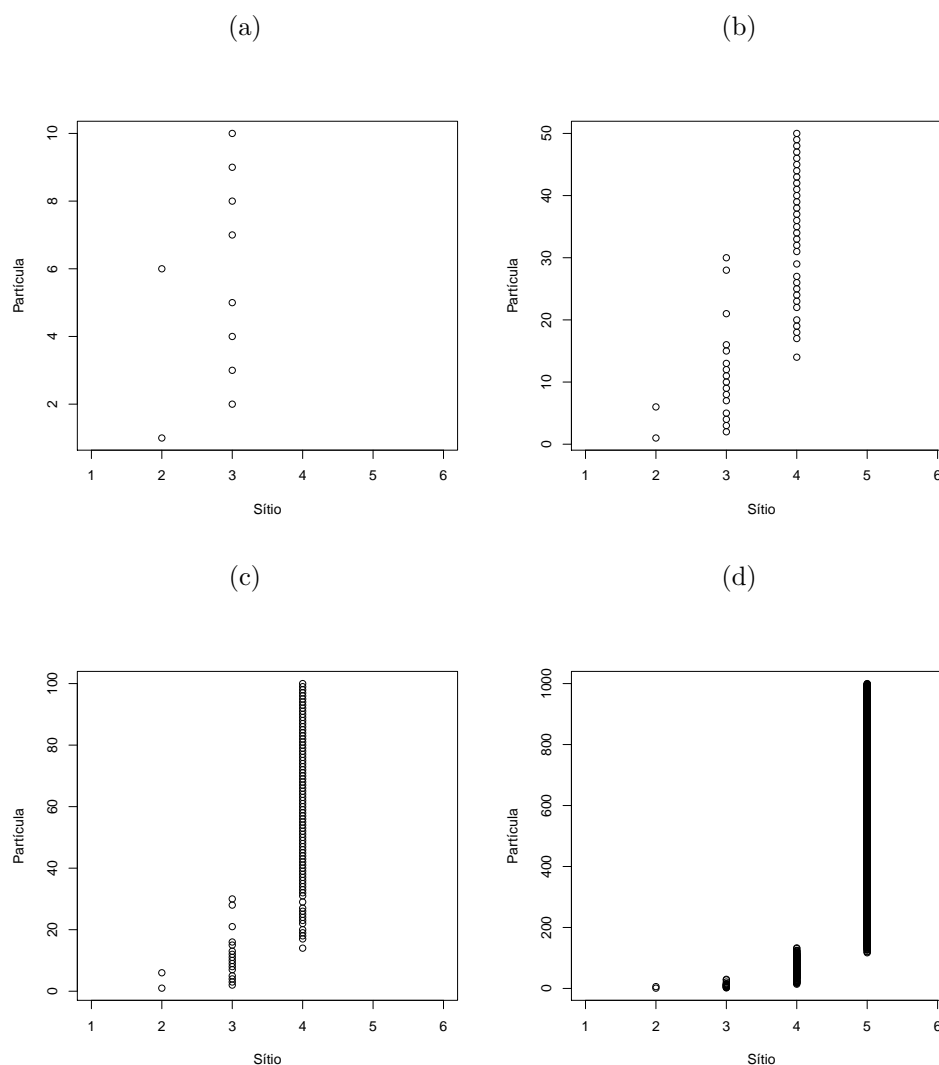
Figura 17 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Observa-se na Figura 17 que a primeira e segunda partículas são adsorvidas pelo sítio 2 as próximas são adsorvidas pelos sítios subsequentes.

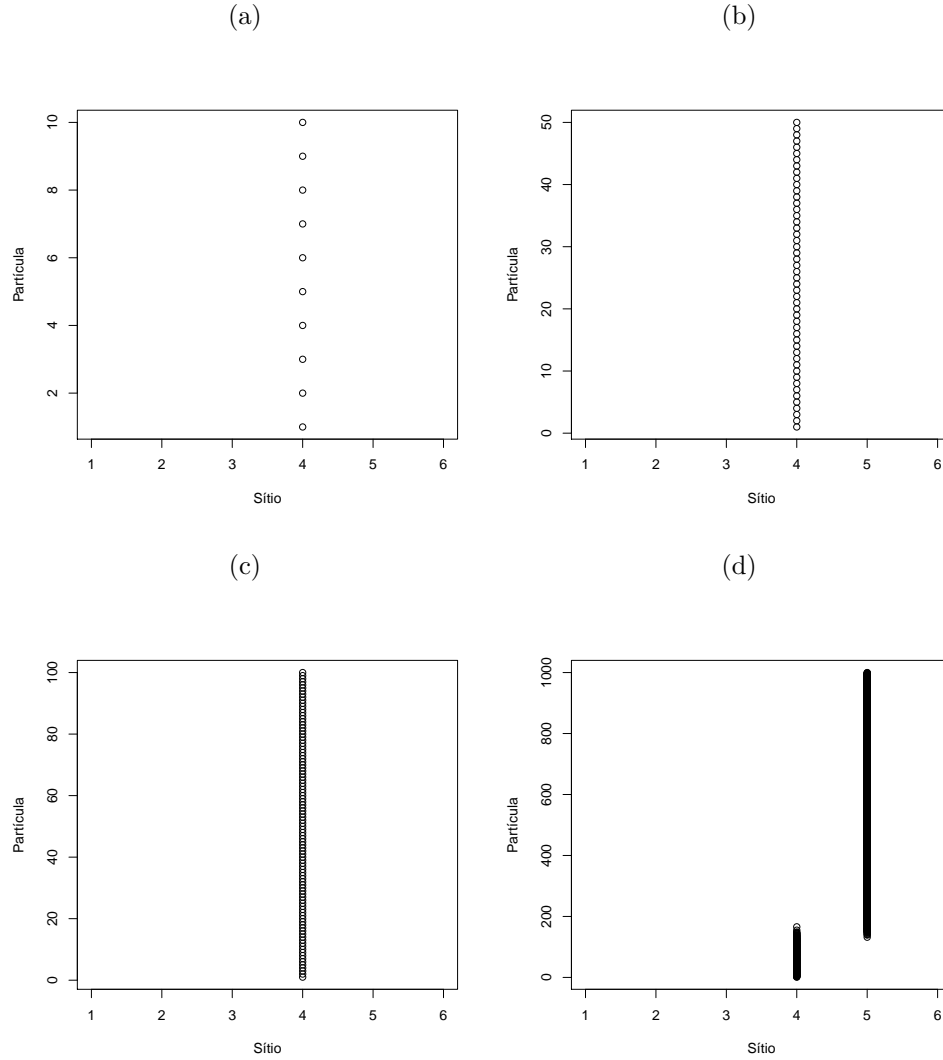
Figura 18 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Na Figura 18 é possível ver que as partículas são adsorvidas pelos sítios subsequentes.

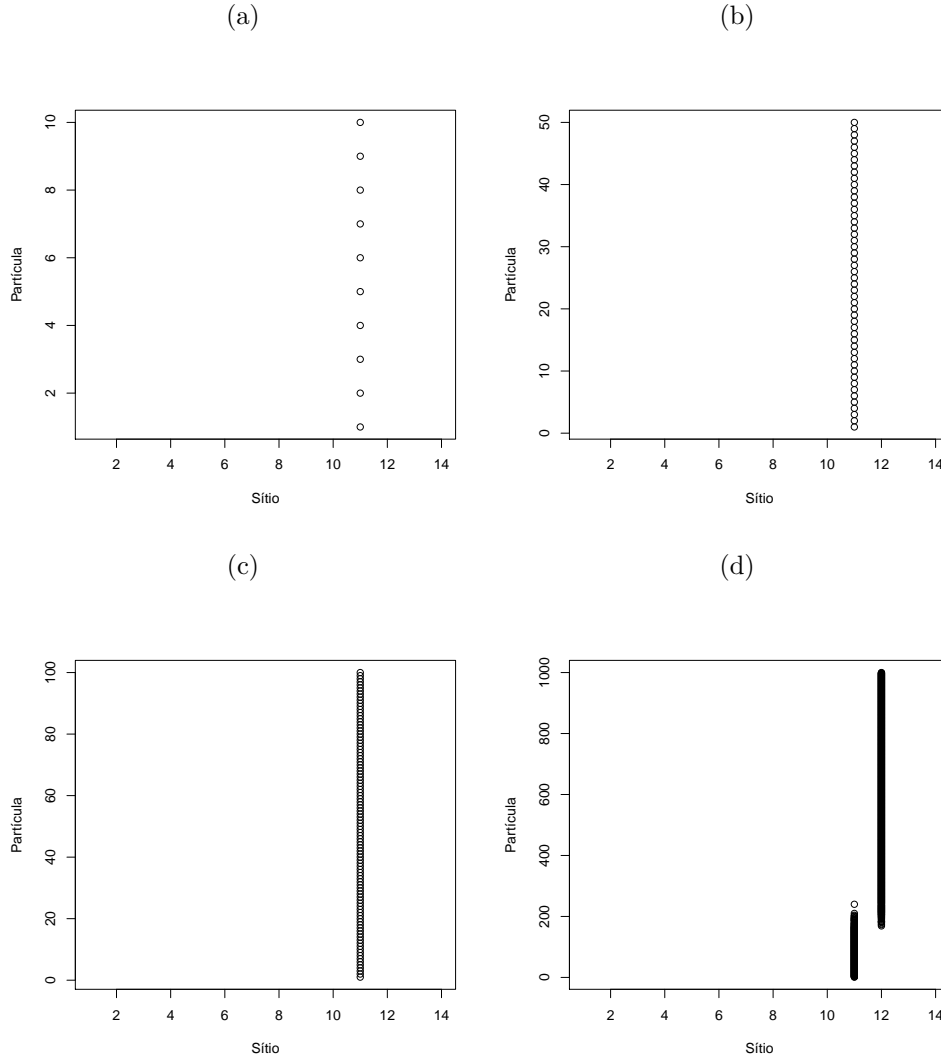
Figura 19 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (6, 7, 9, 4, 6, 24, 22, 13, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Assim como nas duas últimas representações é possível ver na Figura 19 que as partículas são adsorvidas pelos sítios subsequentes, porém nesse caso as primeiras partículas são adsorvidas pelos sítio 8.

Figura 20 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = \log(i)$, configuração inicial $x = (34, 51, 41, 64, 50, 16, 21, 6, 29, 9, 37, 67, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

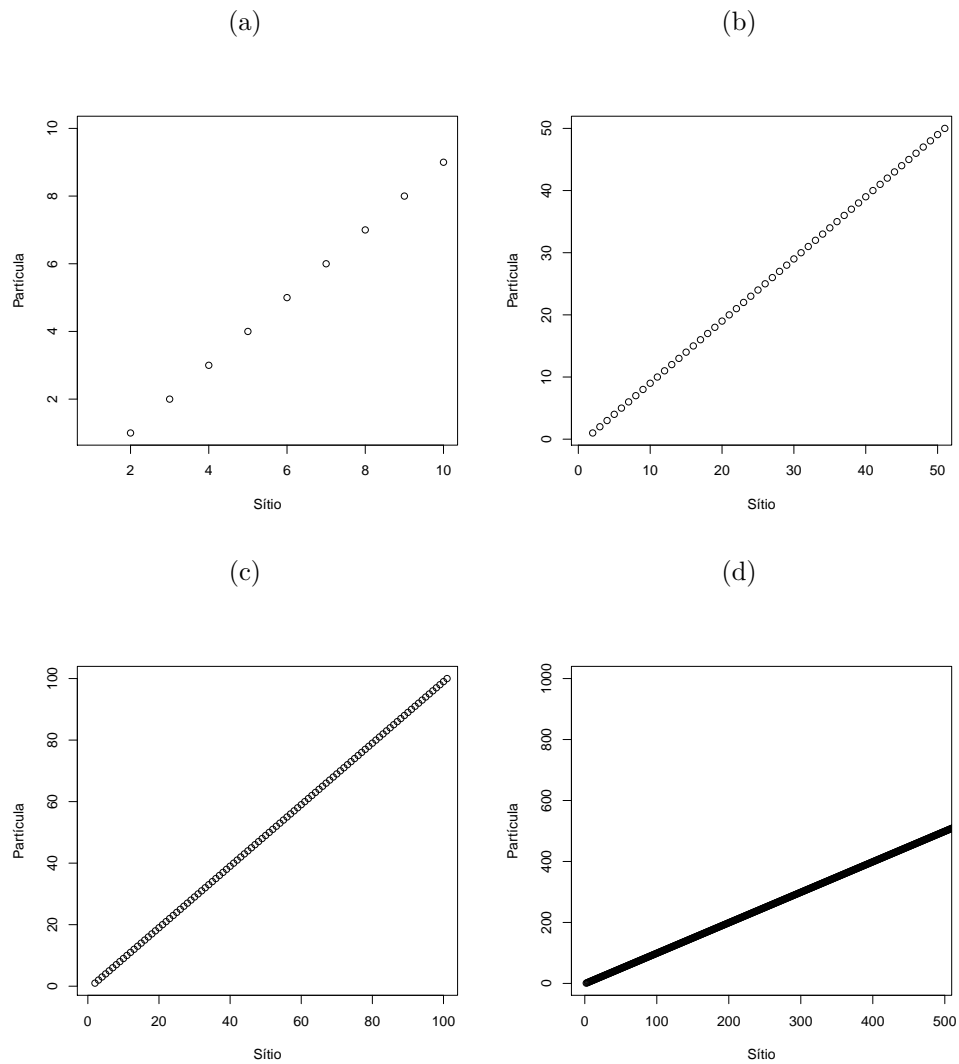


Fonte: os autores

Como pode ser visto na Figura 20 as primeiras partículas são adsorvidas pelo sítio 11, seguindo um comportamento análogo aos demais casos em que a partir de um tempo as partículas são adsorvidas pelos sítios subsequentes.

As Figuras 21,22,23,24 apresentam o sítio em que as primeiras partículas são adsorvidas considerando $\lambda = \log(n)$ com as respectivas configurações iniciais $x = (1, 0, \dots)$, $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$, $x = (20, 9, 37, 44, 44, 9, 40, 50, 0, 0, \dots)$ e $x = (68, 71, 69, 9, 83, 76, 53, 43, 82, 61, 22, 5$

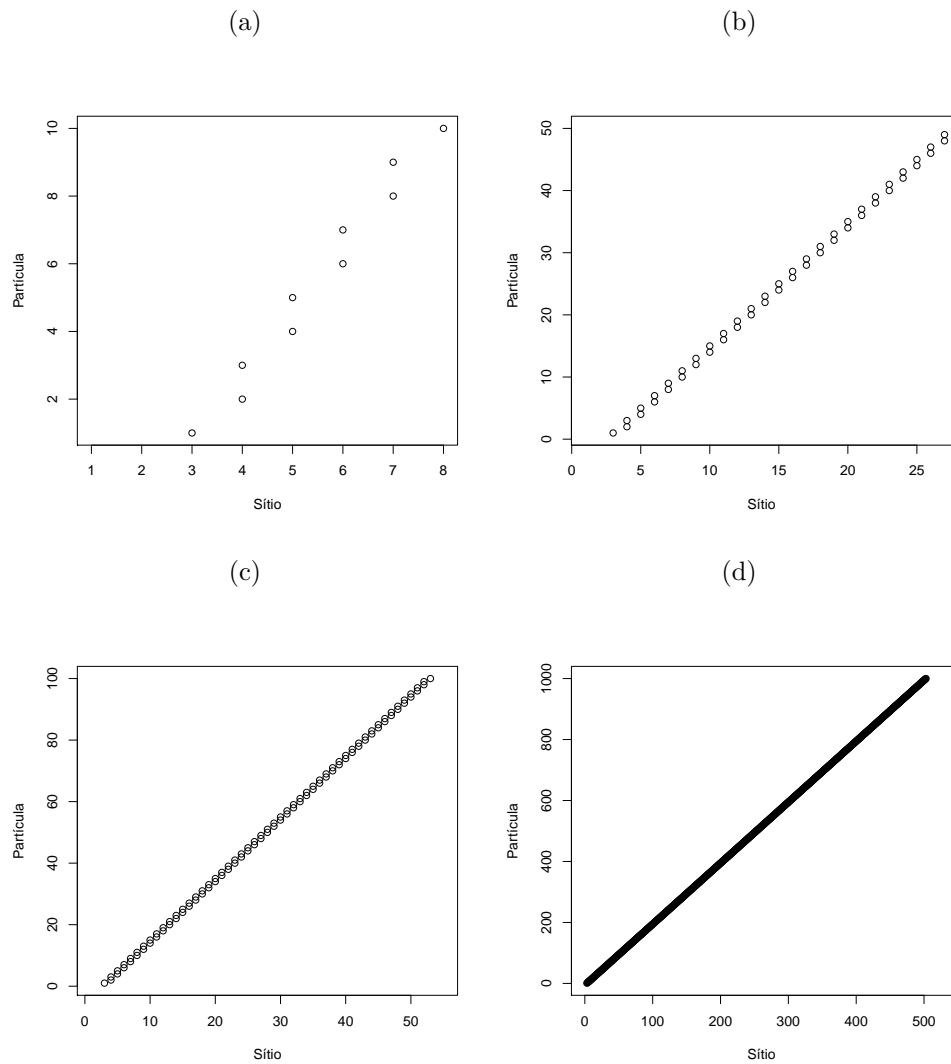
Figura 21 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Na Figura 21 é possível ver que as partículas são adsorvidas pelos sítios subsequentes, sendo que apenas uma partícula é adsorvida em cada sítio.

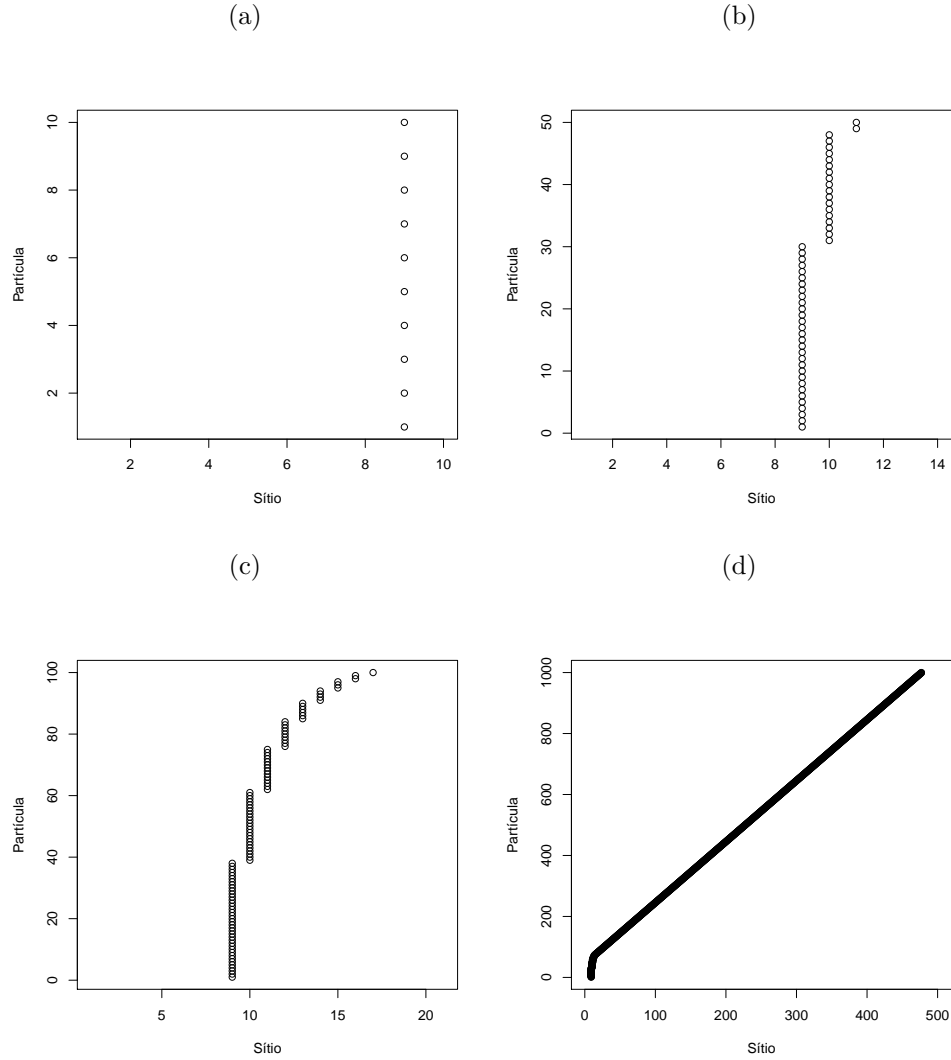
Figura 22 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, 0 \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Pode-se notar na Figura 22 que as partículas são adsorvidas pelos sítios subsequentes, nesse caso cada sítio adsorve duas partículas.

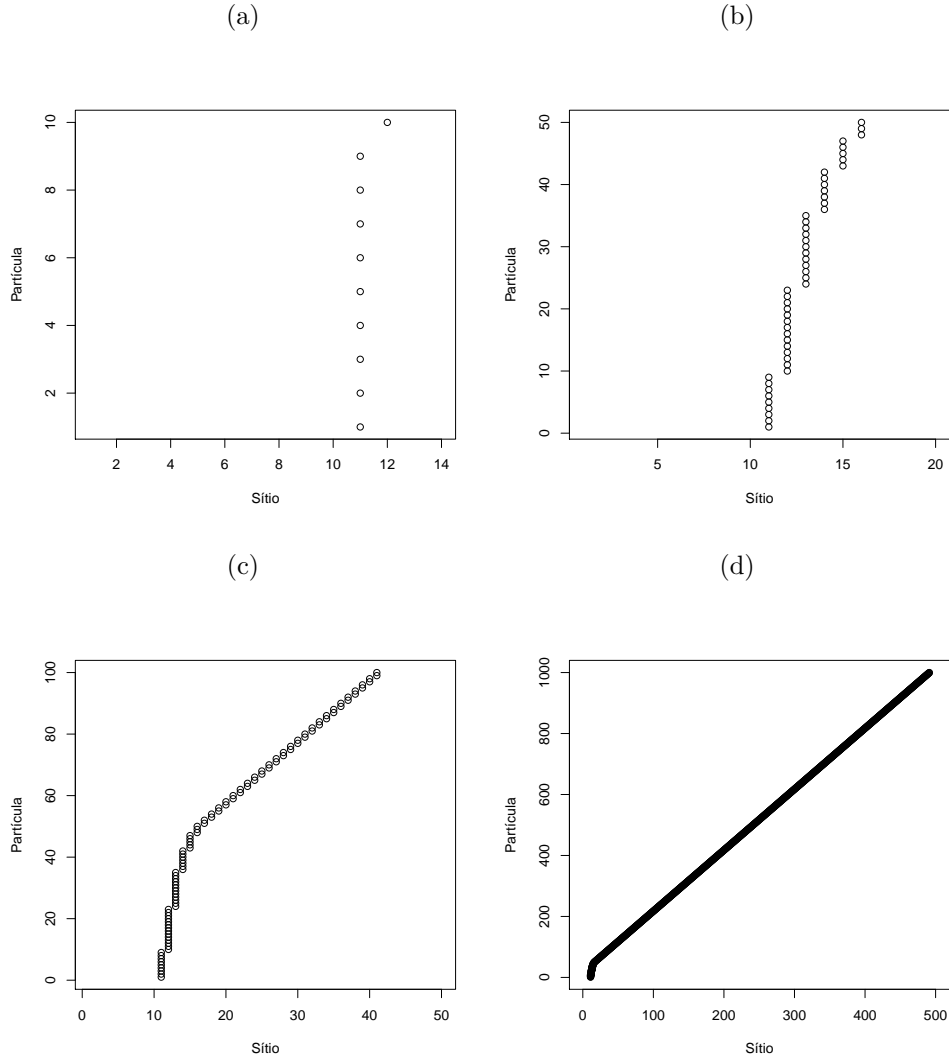
Figura 23 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (20, 9, 37, 44, 44, 9, 40, 50, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

Observa-se na figura 23 que as primeiras partículas são adsorvidas pelo sítio 9 depois são adsorvidas pelos sítios subsequentes, pode-se observar na Figura 24(c) que depois de adsorvidas algumas partículas o comportamento do processo de adsorção fica como o processo apresentado na Figura 22, ou seja, cada sítio adsorve duas partículas.

Figura 24 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = e^i$, configuração inicial $x = (68, 71, 69, 9, 83, 76, 53, 43, 82, 61, 22, 5, 0, 0, \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



Fonte: os autores

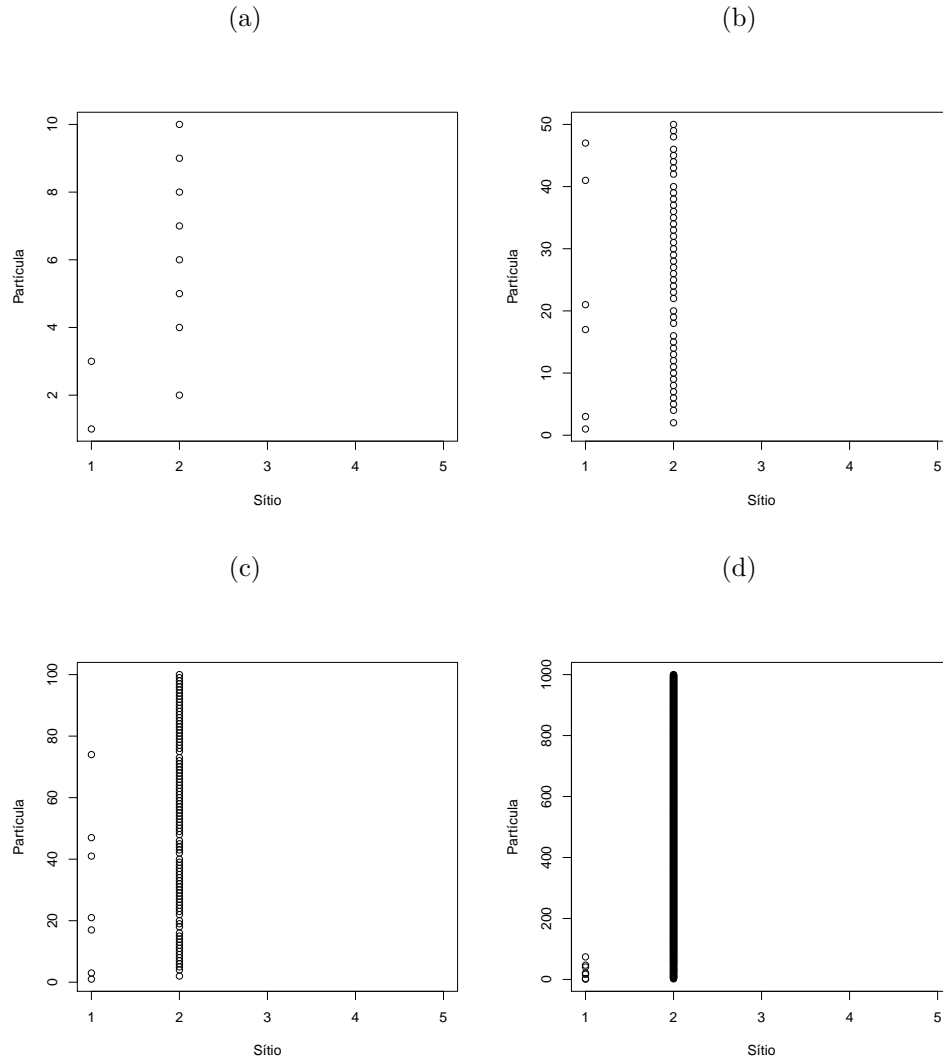
Na figura 24 é possível observar que o comportamento é análogo ao apresentado anteriormente na Figura 23, depois de algumas partículas adsorvidas então um sítio i adsorve duas partículas, depois o sítio $i+1$ adsorve as próximas duas e assim sucessivamente.

6.2.3 Caso geral

Para verificar o comportamento do processo de adsorção quando a função $i \rightarrow \lambda$ possui máximos locais foram realizadas simulações com diferentes configurações iniciais considerando $\lambda_i = |\text{sen}(i)|$.

A Figura 25 apresenta o sítio em que as partículas são adsorvidas considerando a configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$

Figura 25 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = |\text{sen}(i)|$, configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

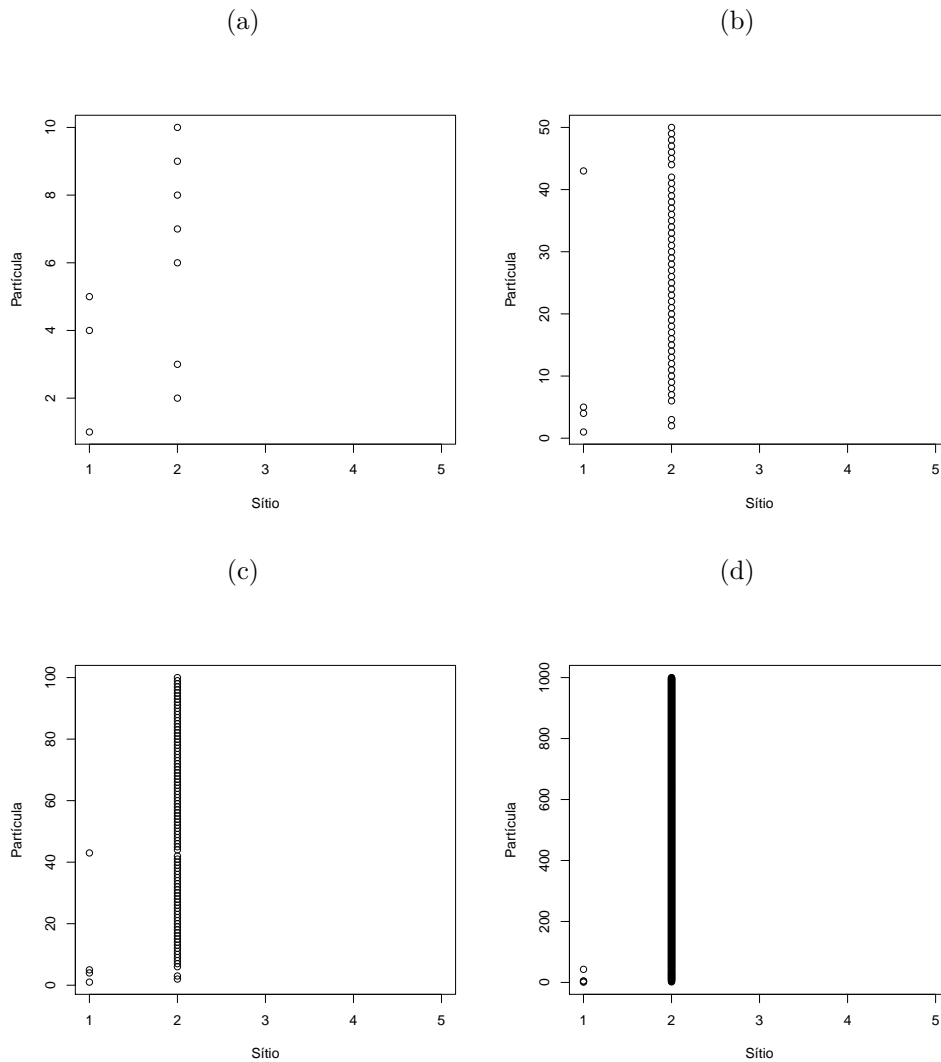


Fonte: os autores

Observa-se na Figura 25 que as primeiras partículas são adsorvidas pelos sítios 1 e 2 e depois de adsorvidas algumas partículas o sítio 2 passa a adsorver todas as próximas partículas, como a função apresenta um máximo local em 2 o resultado obtido pela simulação está de acordo com o resultado do Teorema (2.2.4).

Na Figura 26 está apresentado o sítio em que cada partícula é adsorvida considerando a configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$

Figura 26 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = |\text{sen}(n)|$, configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0 \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

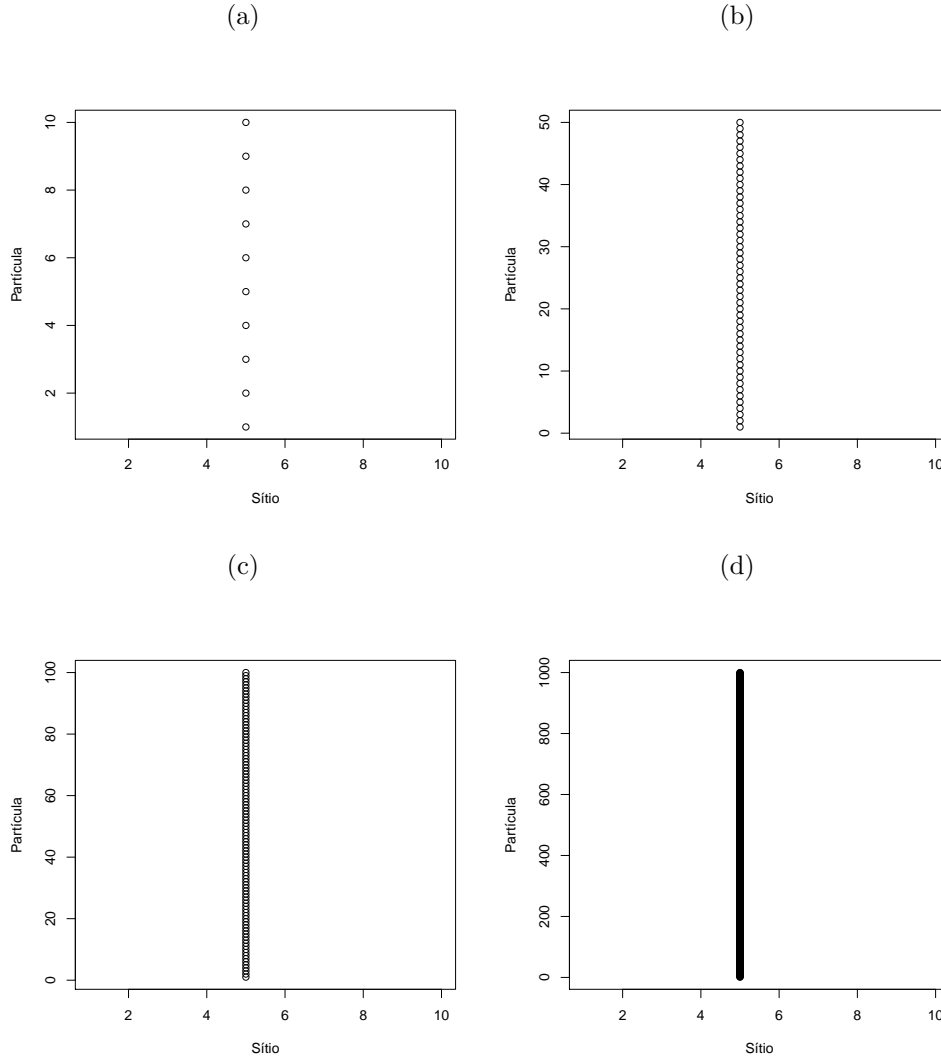


Fonte: os autores

Pode-se observar na Figura 26 que as partículas são adsorvidas pelo sítio 2 com exceção de algumas que são adsorvidas pelo sítio 1, porém depois de adsorvidas aproximadamente 40 partículas o único sítio que adsorve as próximas partículas é o sítio 2 que é um máximo local.

A Figura 27 apresenta o sítio em que as partículas são adsorvidas considerando uma configuração inicial com uma quantidade aleatória de partículas nos primeiros 8 sítios. Para esse caso em particular a configuração inicial foi $x = (2, 19, 21, 17, 29, 14, 25, 10, 0, \dots)$

Figura 27 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = |\text{sen}(n)|$, configuração inicial $x = (2, 19, 21, 17, 29, 14, 25, 10, 0, \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.

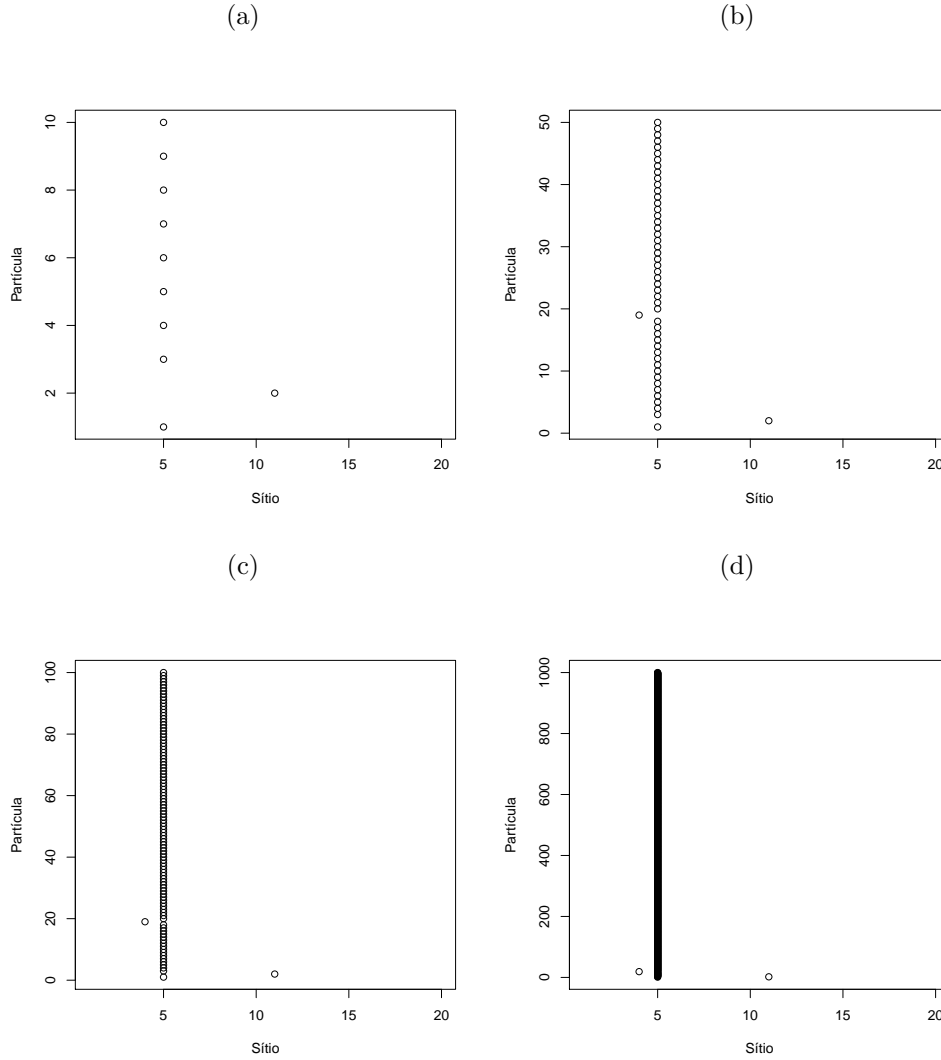


Fonte: os autores

Considerando a configuração inicial da Figura 27 é possível notar que as primeiras 1000 partículas são todas adsorvidas pelo sítio 5 que também é um máximo local, o que está de acordo com o resultado do Teorema 2.2.4, ou seja para uma configuração inicial x existe um máximo local tal que a partir de um tempo adsorve todas as partículas.

Na Figura 28 está o sítio em que as partículas são adsorvidas considerando uma configuração inicial com uma quantidade aleatória de partículas nos primeiros 12 sítios. Para esse caso em particular a configuração inicial foi $x = (2, 3, 5, 3, 3, 4, 2, 1, 4, 3, 2, 4, 0, \dots)$

Figura 28 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = |\text{sen}(n)|$, configuração inicial $x = (2, 3, 5, 3, 3, 4, 2, 1, 4, 3, 2, 4, 0 \dots)$. e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ e (d) $n=1000$.



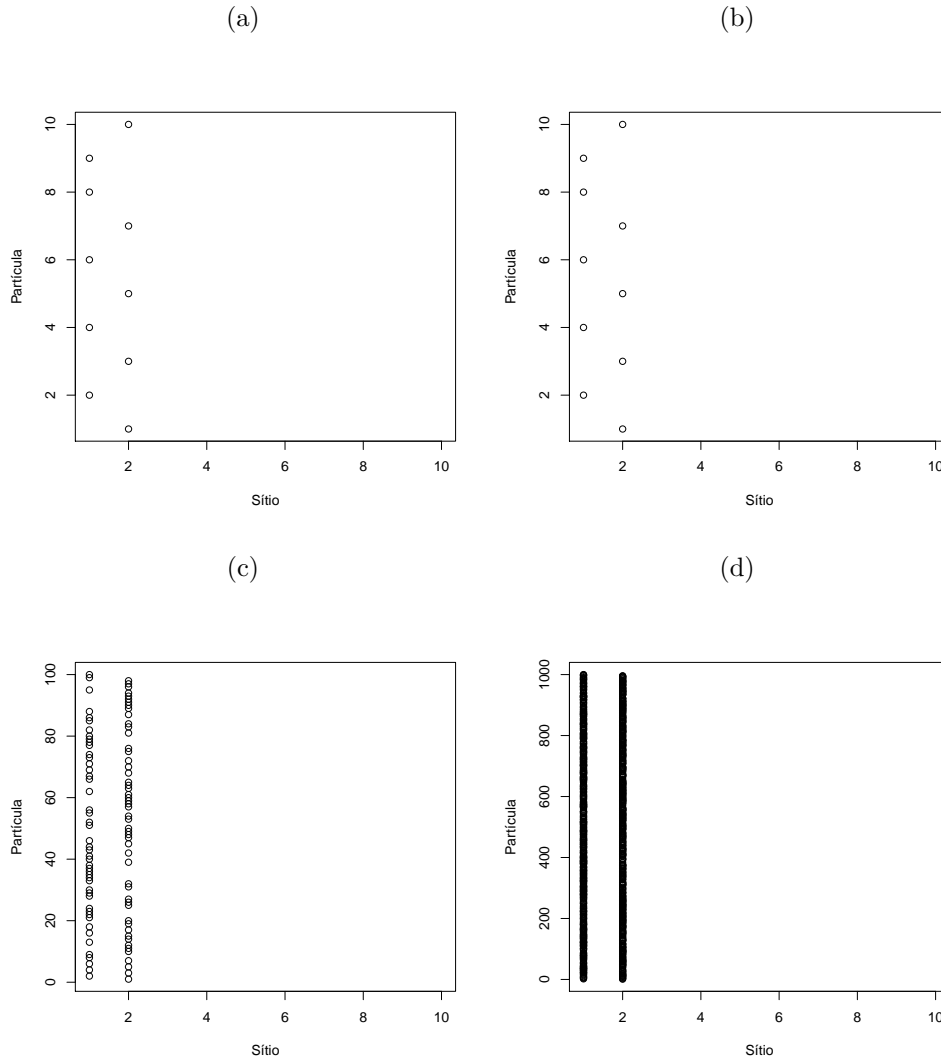
Fonte: os autores

Todas partículas são adsorvidas pelo sítio 5, que é um máximo local, a partir de um tempo como pode ser visualizado na Figura 28, portanto o comportamento está de acordo com o Teorema 2.2.4.

6.2.4 Lambdas constantes

Nas próximas figuras estão apresentados os sítios em que cada umas das partículas são adsorvidas considerando diferentes configurações iniciais.

Figura 29 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (1, 0, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=10$ (b) $n=50$ (c) $n=100$ (d) $n=1000$.

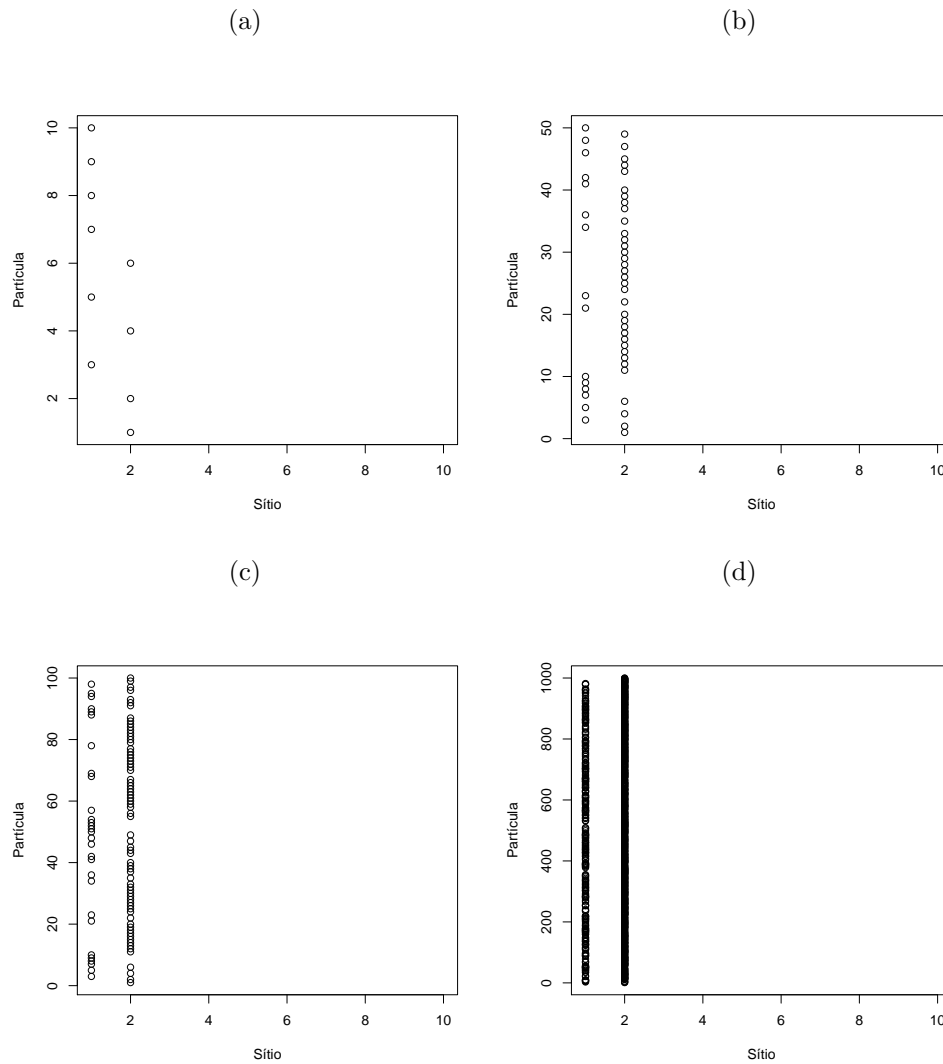


Fonte: os autores

Observa-se na Figura 29 que todas as partículas são adsorvidas pelos sítios 1 e 2, já que o sítio 3 não adsorveu nenhuma partícula a probabilidade de adsorção nesses dois sítios são iguais em todo o processo de adsorção das partículas.

A Figura 30 mostra o processo de adsorção das partículas considerando uma configuração inicial, $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$, em que o sítio 2 tem uma vizinhança um pouco maior do que os demais sítios com probabilidade positiva de adsorver a próxima partícula.

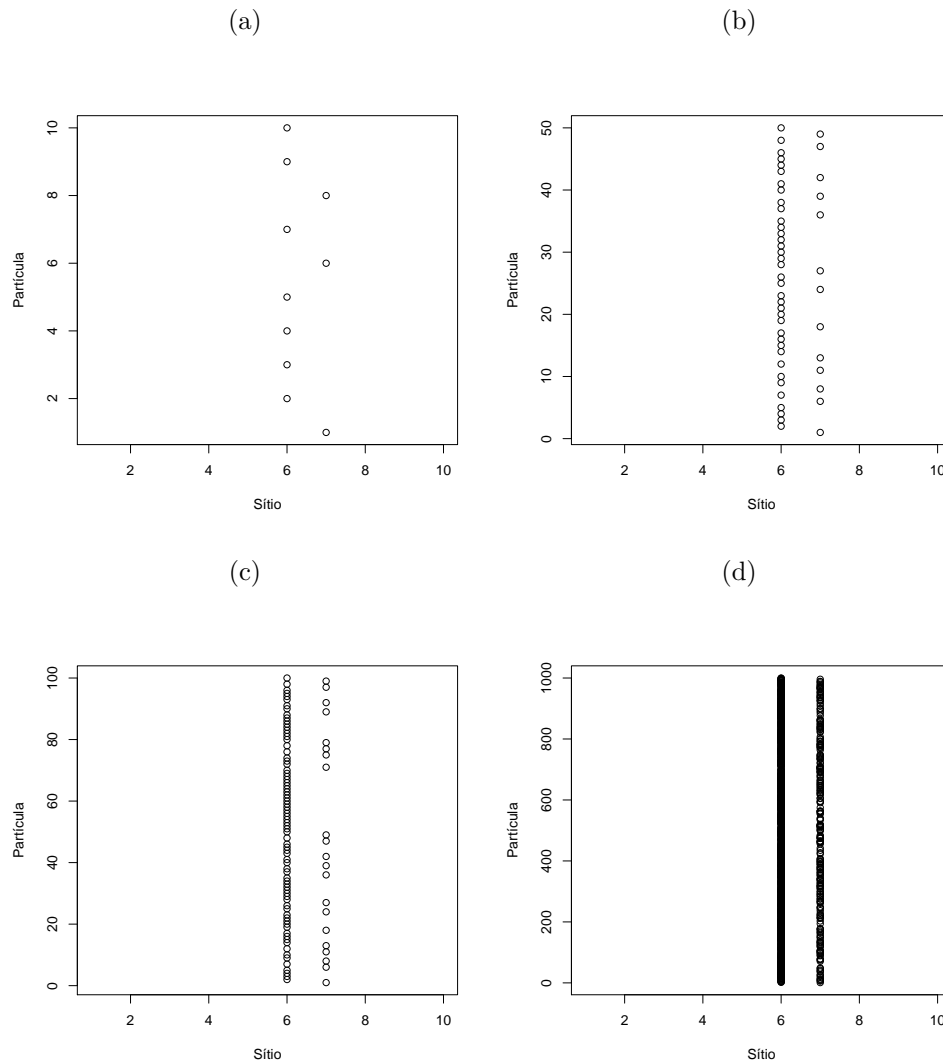
Figura 30 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (1, 2, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=100$ (b) $n=1000$.



Fonte: os autores

Na Figura 30 é possível ver que todas as partículas são adsorvidas pelos sítios 2 e 3.

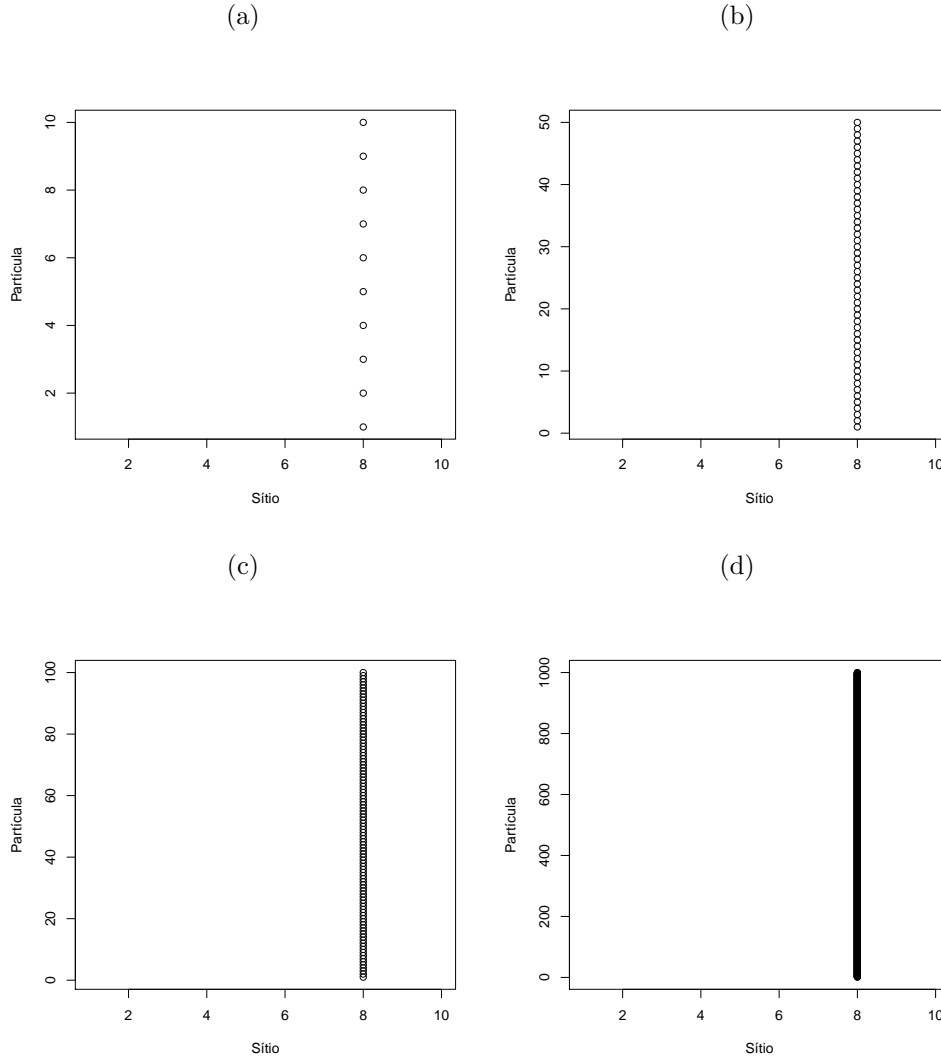
Figura 31 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (1, 4, 3, 1, 2, 3, 4, 1, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=100$ (b) $n=1000$.



Fonte: os autores

Já na Figura 31 observa-se que todas as partículas são adsorvidas pelos sítios 6 e 7.

Figura 32 – Adsorção das partículas considerando $\lambda_i = 1$ e configuração inicial $x = (28, 4, 22, 25, 11, 21, 13, 23, 30, 3, 14, 21, 0, \dots)$ e os momentos de transição (a) $n=100$ (b) $n=1000$.



Fonte: os autores

Na Figura 32 podemos ver que todas as partículas são adsorvidas pelo sítio 8. Pelas simulações conclui-se que se dois sítios têm uma vizinhança com probabilidades de adsorção semelhantes então esses dois irão adsorver todas as partículas a partir de um instante t , já se um sítio tem probabilidade muito maior que os demais sítios de adsorver a primeira partícula, como aconteceu com o sítio 8, então este adsorverá todas as partículas a partir de um tempo t .

7 Considerações finais

Neste trabalho, através de um modelo probabilístico, estudou-se o comportamento do processo de adsorção de partículas em uma superfície adsorvente. Foram obtidos resultados sobre a ocorrência ou não de explosão para diferentes taxas de adsorção. Quando a taxa de cada sítio i adsorver a próxima partícula é exponencial e depende de um λ_i foi considerado também diferentes valores de λ 's. Foram apresentados os resultados de simulações mostrando os sítios em que as primeiras partículas foram adsorvidas a partir de uma configuração inicial dada, considerando a taxa exponencial. Os resultados obtidos estavam de acordo com as simulações realizadas.

Na realização deste trabalho deparamo-nos com alguns problemas interessantes, alguns foram abordados por nós outros não, sendo assim deixamos aqui alguns assuntos que podem ser aprofundados, na sequência deste trabalho, como, estudar o comportamento do processo de adsorção para a taxa exponencial quando λ 's são iguais, estudar o comportamento do processo de adsorção para diferentes taxas e vizinhanças e o estudo de uma abordagem prática para o modelo estudado.

Referências

- AGUIAR, M. R. M. P. de; NOVAES, A. C.; GUARINO, A. W. S. Remoção de metais pesados de efluentes industriais por aluminossilicatos. *Química Nova*, v. 25, n. 6b, p. 1145–1154, 2002.
- ANSÓN, A.; JAGIELLO, J.; PARRA, J. B.; SANJUÁN, M. L.; BENITO, A. M.; MASER, W. K.; MARTÍNEZ, M. T. Porosity, surface area, surface energy, and hydrogen adsorption in nanostructured carbons. *The Journal of Physical Chemistry B*, v. 108, n. 40, p. 15820–15826, 2004.
- BORBA, C. E. *Modelagem da remoção e metais pesados em coluna de adsorção de leito fixo*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP, 2006. Disponível em: <<http://repositorio.unicamp.br/jspui/handle/REPOSIP/267400>>.
- BREMAUD, P. *Markov Chains: Gibbs Fields, Monte Carlo Simulation, and Queues*. [S.l.]: Springer New York, 2013. (Texts in Applied Mathematics). ISBN 9781475731248.
- COSTA, M.; MENSHIKOV, M.; SHCHERBAKOV, V.; VACHKOVSKAIA, M. Localisation in a growth model with interaction. 2018.
- DABROWSKI, A. Advances in colloid and interface science. *Elsevier Science*, v. 93, p. 135–224, 2001.
- DURRETT, R. *Essentials of Stochastic Processes*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2016. (Springer Texts in Statistics). ISBN 9783319456133.
- EVANS, J. W. Random and cooperative sequential adsorption. *Reviews of modern physics*, v. 65, n. 4, p. 1281–1329, 1993.
- KERSTING, G.; KLEBANER, F. C. Sharp conditions for nonexplosions and explosions in markov jump processes. *The Annals of Probability*, v. 23, n. 1, p. 268–272, 1995.
- MENSHIKOV, M.; PETRITIS, D. Explosion, implosion, and moments of passage times for continuous-time markov chains: a semimartingale approach. *Stochastic Processes and their Applications*, v. 124, n. 7, p. 2388–2414, 2014.
- MENSHIKOV, M.; POPOV, S.; WADE, A. *Non-homogeneous Random Walks: Lyapunov Function Methods for Near-Critical Stochastic Systems*. Cambridge University Press, 2016. (Cambridge Tracts in Mathematics). ISBN 9781107026698. Disponível em: <<https://books.google.com.br/books?id=xuRDvgAACAAJ>>.
- POZZA, A. A. A.; CURI, N.; GUILHERME, L. R. G.; MARQUES, J. J. G. S. M.; COSTA, E. T. S.; ZULIANI, D. Q.; MOTTA, P. E. F.; MARTINS, R. S.; OLIVEIRA, L. C. A. Adsorção e dessorção aniônicas individuais por gibbsita pedogenética individual anionic adsorption and desorption by pedogenic gibbsite. *Química Nova*, v. 32, n. 1, p. 99–105, 2009.
- R Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. Vienna, Austria, 2017. Disponível em: <<https://www.R-project.org/>>.

- RESNICK, S. *Adventures in Stochastic Processes*. [S.l.]: Birkhäuser Boston, 2013. ISBN 9781461203872.
- REZENDE, M. C. R. A.; WADA, C. M.; LOPES, M. R. A. N. E.; CAPALBO, L. C.; GONÇALVES, V. M.; VALENTE, A. D. B.; OLIVEIRA, J. A. G. de. O papel da adsorção de proteínas na osseointegração. *Archives of health investigation*, v. 4, n. 3, p. 18–25, 2015.
- ROSS, S. M. *A First Course in Probability*. [S.l.]: Prentice-Hall, 2010. ISBN 0131856626.
- ROUQUEROL, J.; ROUQUEROL, F.; LLEWELLYN, P.; MAURIN, G.; SING, K. S. *Adsorption by powders and porous solids: principles, methodology and applications*. [S.l.]: Academic press, 2013.
- SHCHERBAKOV, V.; VOLKOV, S. Stability of a growth process generated by monomer filling with nearest-neighbour cooperative effects: a semimartingale approach. *Stochastic Processes and their Applications*, v. 120, n. 6, p. 926–948, 2010.
- WEBER, W. *Physicochemical processes for water quality control*. [S.l.]: Wiley-Interscience, 1972. (Environmental science and technology). ISBN 9780471924357.

Anexos

ANEXO A – Ideia da Demonstração das hipóteses 1 e 2

Demonstração. Podemos supor sem perda de generalidade uma configuração inicial x tal que $\xi_1 = 1$ e $\xi_i = 0$ para todo $i \neq 1$. Seja

$$T_y^s := \{\text{o sítio } s \text{ adsorve a próxima partícula considerando a configuração } y\}.$$

Inicialmente vamos verificar que a probabilidade de um sítio s adsorver a primeira partícula a partir da configuração inicial x é maior se cada sítio do 2 ao S adsorver apenas uma partícula cada. Para verificar essa afirmação vamos considerar y_i , em que $i \in \{s-1, \dots\}$, todas as possíveis configurações em que são adsorvidas $i-1$ partículas e o sítio s adsorve a primeira partícula. Portanto y_{s-1} é uma configuração única em que cada sítio do 2 até o sítio s adsorve apenas uma partícula. Dessa forma, queremos mostrar que

$$P_x[T_{y_{s-1}}^s] \geq P_x[T_{y_i}^s], \forall i.$$

Facilmente se verifica que $P_x[T_{y_{s-1}}^s] \geq P_x[T_{y_s}^s]$ para todo y_s . Considerando y'_s uma das possíveis configurações de y_s , em que são adsorvidas uma partícula no sítio 2 duas partículas no sítio 3 e uma partícula do sítio 4 ao sítio s . Então,

$$\begin{aligned} P_x[y'_s] &= P_x[A_{\omega_1}^2] \times P_x[A_{\omega_2}^3 \mid A_{\omega_1}^2] \times \dots \times P_x[A_{\omega_s}^s \mid A_{\omega_1}^2 \cap A_{[\omega_2, \omega_3]}^3 \cap A_{\omega_4}^4 \cap \dots \cap A_{\omega_{s-1}}^{s-1}] \\ &= \frac{e^{\lambda_2}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2})} \times \frac{e^{\lambda_3}}{(e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3})} \times \frac{e^{2\lambda_3}}{(e^{2\lambda_1} + e^{3\lambda_2} + e^{2\lambda_3} + e^{\lambda_4})} \times \frac{e^{2\lambda_4}}{(e^{2\lambda_1} + e^{4\lambda_2} + e^{3\lambda_3} + e^{2\lambda_4})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{\lambda_5}}{(e^{2\lambda_1} + e^{4\lambda_2} + e^{4\lambda_3} + e^{3\lambda_4} + e^{\lambda_5})} \times \dots \times \frac{e^{\lambda_s}}{(e^{2\lambda_1} + e^{4\lambda_2} + e^{4\lambda_3} + e^{4\lambda_4} + \sum_{i=5}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \\ &\leq \frac{e^{\lambda_2}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2})} \times \frac{e^{\lambda_3}}{(e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3})} \times \frac{e^{2\lambda_3}}{(e^{2\lambda_1} + e^{3\lambda_2} + e^{2\lambda_3} + e^{\lambda_4})} \times \frac{e^{\lambda_4} e^{\lambda_4}}{(e^{2\lambda_1} + e^{3\lambda_2} + e^{2\lambda_3} + e^{\lambda_4})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{\lambda_5}}{(e^{2\lambda_1} + e^{3\lambda_2} + e^{3\lambda_3} + e^{2\lambda_4} + e^{\lambda_5})} \times \dots \times \frac{e^{\lambda_s}}{(e^{2\lambda_1} + \sum_{i=2}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \\ &= \frac{e^{2\lambda_3 + \lambda_4}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2}) + (e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3}) + \dots + (e^{2\lambda_1} + e^{4\lambda_2} + e^{4\lambda_3} + \sum_{i=4}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{\sum_2^s e^{\lambda_i}}}{e^{2\lambda_1} + e^{3\lambda_2} + e^{2\lambda_3} + e^{\lambda_4}} \\ &\leq \frac{e^{\sum_2^s e^{\lambda_i}}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2}) + (e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3}) + \dots + (e^{2\lambda_1} + e^{4\lambda_2} + e^{4\lambda_3} + \sum_{i=4}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \\ &= P_x[y_{s-1}], \end{aligned}$$

de forma análoga pode-se verificar que essa desigualdade vale para qualquer configuração y_s . Além disso, já que y_{s+k} são todas as configurações em que são adsorvidas $s+k-1$ dos sítios 1 ao sítio $s-1$ e uma partícula no sítio s vamos considerar y'_{s+k} umas das possíveis configurações de y_{s+k} definida da seguinte forma

$$y'_{s+k} := \{\text{são adsorvidas } k+3 \text{ partículas em 2 e uma partícula do sítio 3 ao sítio } s\}.$$

Então,

$$\begin{aligned} P_x[y'_{s+k}] &= P_x[A_{\omega_1}^2] \times \cdots \times P_x[A_{\omega_{k+2}}^2 \mid A_{[\omega_1, \omega_{k+1}]}^2] \times \cdots \times P_x[A_{\omega_{s+k}}^s \mid A_{[\omega_1, \omega_{k+2}]}^2] \cap \cdots A_{\omega_{s+k-1}}^{s-1}] \\ &= \frac{e^{\lambda_2}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2})} \times \frac{e^{2\lambda_2}}{(e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3})} \times \cdots \times \frac{e^{(k+1)\lambda_2}}{(e^{(k+2)\lambda_1} + e^{(k+2)\lambda_2} + e^{(k+1)\lambda_3})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{(k+2)\lambda_3}}{(e^{(k+3)\lambda_1} + e^{(k+3)\lambda_2} + e^{(k+2)\lambda_3})} \times \frac{e^{\lambda_4}}{(e^{(k+3)\lambda_1} + e^{(k+4)\lambda_2} + e^{(k+3)\lambda_3} + e^{\lambda_4})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{\lambda_5}}{(e^{(k+3)\lambda_1} + e^{(k+4)\lambda_2} + e^{(k+4)\lambda_3} + e^{2\lambda_4} + e^{\lambda_5})} \times \cdots \times \\ &\quad \times \frac{e^{\lambda_s}}{(e^{(k+3)\lambda_1} + e^{(k+4)\lambda_2} + e^{(k+4)\lambda_3} + \sum_{i=4}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \\ &\geq \frac{e^{\lambda_2}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2})} \times \frac{e^{2\lambda_2}}{(e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3})} \times \cdots \times \frac{e^{(k+1)\lambda_2}}{(e^{(k+2)\lambda_1} + e^{(k+2)\lambda_2} + e^{(k+1)\lambda_3})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{(k+2)\lambda_2} e^{\lambda_3}}{(e^{(k+3)\lambda_1} + e^{(k+3)\lambda_2} + e^{(k+2)\lambda_3})} \times \frac{e^{(k+2)\lambda_3}}{(e^{(k+4)\lambda_1} + e^{(k+4)\lambda_2} + e^{(k+3)\lambda_3} + e^{\lambda_4})} \times \\ &\quad \times \frac{e^{\lambda_s}}{(e^{(k+4)\lambda_1} + e^{(k+5)\lambda_2} + e^{(k+5)\lambda_3} + \sum_{i=4}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \\ &= P_x[A_{\omega_1}^2] \times \cdots \times P_x[A_{\omega_{k+3}}^2 \mid A_{[\omega_1, \omega_{k+2}]}^2] \times \cdots \times P_x[A_{\omega_{s+k+1}}^s \mid A_{[\omega_1, \omega_{k+3}]}^2] \cap \cdots A_{\omega_{s+k}}^{s-1}] \\ &= P_x[y'_{s+k+1}]. \end{aligned}$$

Logo, por indução a afirmação (3.14) é verdadeira, ou seja, quanto mais partículas são adsorvidas menor a probabilidade do sítio s adsorver a próxima partícula. Assim,

$$\begin{aligned} \sum_{s=2}^{\infty} P_x[T_y^s] &\leq \sum_{s=2}^{\infty} P_x[T_{y_{s-1}}^s] \\ &= \sum_{s=2}^{\infty} \frac{e^{\lambda_2}}{e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2}} \times \frac{e^{\lambda_3}}{e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3}} \times \cdots \times \frac{e^{\lambda_s}}{e^{2\lambda_1} + \sum_{i=2}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s}} \\ &\quad \times \frac{e^{\sum_{i=2}^s \lambda_i}}{(e^{\lambda_1} + e^{\lambda_2})(e^{2\lambda_1} + e^{2\lambda_2} + e^{\lambda_3}) \cdots (e^{2\lambda_1} + \sum_{i=2}^{s-2} e^{3\lambda_i} + e^{2\lambda_{s-1}} + e^{\lambda_s})} \\ &\leq \sum_{s=2}^{\infty} \frac{e^{\sum_{i=2}^s \lambda_i}}{2e^{\lambda_2} 3e^{\lambda_3} \cdots se^{\lambda_s}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{s=2}^{\infty} \frac{e^{\sum_{i=2}^s \lambda_i}}{s! e^{\sum_{i=2}^s \lambda_i}} \\
&= e - 2 < \infty
\end{aligned}$$

Portanto, podemos afirmar quase certamente que existe um sítio aleatório s tal que nenhum sítio $l > s$ adsorve partículas pela configuração y .

□

ANEXO B – Ideia da Demonstração da hipótese 3

Demonstração. Seja $x = (1, 0, \dots)$ a configuração inicial e suponhamos sem perda de generalidade que $1 \in M$, ou seja $\{1, m_1, m_2, \dots\} \in M$, em que M é o conjunto de máximos locais da função $i \rightarrow \lambda_i$. Vamos considerar o seguinte evento

$C^i :=$ a partícula é adsorvida no i -ésimo máximo local depois de 1 por uma configuração y , e a seguinte configuração

$y_1 :=$ uma única partícula é adsorvida no primeiro sítio após o i -ésimo máximo local.

Então,

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^{\infty} P_y[C^i] &\leq \sum_{i=1}^{\infty} P_x[\text{ocorrer } y_1] \\
 &\leq \sum_{i=1}^{\infty} P_x[\text{primeiro sítio após o } i\text{-ésimo máximo local adsorve uma partícula}] \\
 &\leq \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})}}{e^{\lambda_{m_1}(\xi_{m_1})} + e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})}} + \dots + \frac{e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})}}{e^{\lambda_{m_{i-1}}(\xi_{m_{i-1}})} + e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})}} \\
 &\leq \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})}}{e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})} + e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})}} + \dots + \frac{e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})}}{e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})} + e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})}} \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \frac{e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})}}{2e^{\lambda_{m_1+1}(\xi_{m_1})}} + \dots + \frac{e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})}}{2e^{\lambda_{m_{i-1}+1}(\xi_{m_{i-1}})}} \\
 &= \sum_{i=1}^{\infty} \left(\frac{1}{2}\right)^{i-1} \\
 &< \infty.
 \end{aligned}$$

Portanto existe quase certamente um sítio $m \in M$ tal que depois desse sítio nenhum outro máximo irá adsorver a próxima partícula.

□